

**Ein Projektivsystem
mit variabler Vergrößerung
für energiefilternde Elektronenmikroskope**

Vom Fachbereich Physik
der Technischen Universität Darmstadt

zur Erlangung des Grades
eines Doktors der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)

genehmigte Dissertation von
Dipl.–Phys. Volker Gerheim
aus Limburg an der Lahn

Referent: Prof. Dr. H. Rose
Korreferent: Prof. Dr. W. Seelig

Tag der Einreichung: 05. 12. 2000
Tag der Prüfung: 12. 02. 2001

Darmstadt 2001
D17

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Eigenschaften von abbildenden Energiefiltern und Projektionssystemen	4
2.1	Abbildende Energiefilter	4
2.2	Projektionssysteme im Anschluß an abbildende Energiefilter	8
3	Abbildungseigenschaften teilchenoptischer Systeme	14
3.1	Grundlagen	16
3.2	Potentialentwicklung entlang einer geraden Achse	19
3.3	Beschreiben des Bewegungsproblems mit Hilfe des Eikonalen	21
3.3.1	Störungsentwicklung des Eikonalen	22
3.3.2	Die Fundamentalbahnen	23
3.3.3	Berechnung der Abbildungsfehler	29
3.4	Methoden zur Berechnung des Potentials eines Multipolelements	35
3.4.1	Analytische Näherung des Potentials	35
3.4.2	Ersatzladungsmethode	41
3.4.3	Abschätzung der Ampèrewindungen auf den Polschuhen	44
3.5	Analytische Methoden zur Berechnung der Fundamentalbahnen	46
3.5.1	Vernachlässigung des Randfeldes	46
3.5.2	Vernachlässigung der Ausdehnung des Feldes	49
4	Berechnung von Projektionssystemen	52
4.1	Symmetrische Projektionssysteme	54

4.2	Asymmetrische Projektionssysteme	64
4.3	Berücksichtigung der Bildfehler	79
4.4	Auswahl des Projektionssystems	82
4.5	Berücksichtigung des Randfeldes	85
4.6	Ergebnisse	86
4.6.1	Die elementspezifische Abbildung	87
4.6.2	Die Elektronen–Energieverlust Spektroskopie	97
5	Das Wien–Filter als abbildendes Energiefilter	105
5.1	Grundlagen des Wien–Filters	106
5.2	Das Wien–Filter mit Randfeld	110
5.3	Ausblick	113
6	Zusammenfassung	117

Kapitel 1

Einleitung

Das Mikroskop erlaubt die Beobachtung von Objekten, die mit bloßem Auge nicht mehr erkennbar sind. Bis zur ersten Hälfte des zwanzigsten Jahrhunderts existierten ausschließlich Lichtmikroskope. Bereits 1876 erkannte Abbe, daß durch die Beugungsbegrenzung die Auflösung nicht wesentlich kleiner als die Größenordnung einer Wellenlänge werden kann [Abbe 1876]. Da keine Materialien zum Bau von fokussierenden Elementen für elektromagnetische Wellen unterhalb der Wellenlänge von Röntgenstrahlung existieren, war es nicht möglich, mit Hilfe der Lichtmikroskopie Strukturen unterhalb von ca. 100 nm zu untersuchen.

Nach der Entdeckung der Welleneigenschaften von de Broglie (1927) wurden Mikroskope vorgeschlagen, die mit geladenen Teilchen anstelle von Licht arbeiten. Die theoretische Auflösungsgrenze beispielsweise eines Elektronenmikroskops mit einer Beschleunigungsspannung von einigen kV liegt weit unter der eines Lichtmikroskopes, da die Wellenlänge der Elektronen deutlich kleiner ist. Die erste magnetische Linse für Elektronenstrahlen wurde von [Busch 1927] entwickelt. In [Rose 1994a] zeigt eine Abbildung die historische Entwicklung der Auflösung vom Jahr 1800 bis 2000.

Im Gegensatz zur Lichtmikroskopie ist es aufgrund des Scherzertheorems [Scherzer 1936b] nicht möglich elektro– beziehungsweise magnetostatische raumladungsfreie Rundlinsen ohne Öffnungs– und Farbfehler zu bauen. Die Auflösungsgrenze in herkömmlichen Transmissionselektronenmikroskopen wird daher durch Farb– und Öffnungsfehler und nicht durch die Beugung begrenzt. Für ein Gerät mit einer Beschleunigungsspannung von 200 kV ist die Auflösungsgrenze schlechter als das 50–fache der Wellenlänge. Bis vor wenigen Jahren konnte eine Auflösungsverbesserung ausschließlich durch eine Erhöhung der Beschleunigungsspannung und damit eine Verkleinerung der Wellenlänge erzielt werden, weil alle Versuche zum Bau und erfolgreichen Betrieb eines Öffnungs– und/oder Farbfehlerkorrektors gescheitert waren. Da bei vielen Materialien die Schwelle für Strahlenschädigung bei Beschleunigungsspannungen von 200 bis 400 kV liegt, lassen sich Höchstspannungsmikroskope bei Spannungen von z. B. 1 MV nur bei wenigen Objekten anwenden.

Im Jahr 1998 ist es der Gruppe von Haider gelungen einen von [Rose 1990a] vorgeschlage-

nen Öffnungsfehlerkorrektor zu bauen und mit seiner Hilfe die Auflösung eines kommerziellen Transmissionselektronenmikroskopes von einigen wenigen Å auf 1.2 Å zu steigern. Der Korrektor besteht aus zwei Rundlinsen–Doublets und zwei Hexapolen [Rose 1990a].

Die Auflösung wird nicht mehr durch den Öffnungsfehler sondern durch die Energiebreite der Quelle und die Farbfehlerkonstante der Objektivlinse beschränkt. Um eine sub-Å Auflösung zu ermöglichen, muß man entweder auch den Farbfehler mit Hilfe eines geeigneten Korrektors korrigieren oder die Energiebreite der Elektronenquelle mit Hilfe eines Monochromators beschränken [Kahl 1999]. Nach [Rose 1999] sind zur Erzielung einer sub-Å Auflösung 0.2 eV für ein 200 kV Gerät ausreichend. Weiterhin müssen die unelastisch gestreuten Elektronen des Objektes berücksichtigt werden. Mit Hilfe eines abbildenden Energiefilters lassen sich diese herausfiltern (zero-loss Filterung). Der Kontrast der Abbildung verbessert sich hierdurch deutlich. Zusätzlich läßt sich mit einem abbildenden Energiefilter das Energieverlustspektrum des ausgeleuchteten Objektbereichs bestimmen sowie eine elementspezifische Abbildung des Objektes vornehmen. Die dafür notwendigen einzustellenden Strahlengänge eines EFTEM (Energy Filtering Transmission Electron Microscope) werden in Kap. 2 beschrieben. Das Elektronenmikroskop wird damit zu einem analytischen Element, daß neben der Objektstruktur auch Informationen über die räumliche Verteilung einzelner chemischer Elemente sowie Aussagen über deren Bindungszustand und Koordinationszahlen liefern kann.

Für eine gute Energieauflösung sollte zum einen die Dispersion des Filters möglichst hoch sein. Dadurch werden kleine Energiefenster realisierbar und die Energieauflösung verbessert sich, da ein gleich großes Fehlerscheibchen bei hoher Dispersion eine kleinere Energieauflösung aufweist (Kap. 2.2). Zum anderen sollten zumindest die geometrischen Fehler zweiter Ordnung des Filters korrigiert sein. Sehr verbreitet ist ein Filtertyp mit symmetrischen Feldern, der auf Grund der omega-förmigen optischen Achse oft als Ω -Filter bezeichnet wird [Rose, Plies 1974, Lanio 1986, Uhlemann 1994]. Ein solches Filter verhält sich wie eine dicke Rundlinse für die elastisch gestreuten Elektronen und wie eine Kombination aus Rundlinse und Prisma für die unelastisch gestreuten Elektronen. Zusätzlich muß die Bildebene des Objektes hinter dem Filter achromatisch sein, da sonst bei großen Energiefenstern der Einfluß der Farbfehler jegliche Abbildung verhindert. Um eine Vignettierung des Bildes oder des Spektrums zu vermeiden, sollte die Energieselektion in einer Beugungsebene stattfinden. Gleichzeitig werden dadurch kleine Energiefenster ermöglicht, da das Filter bei einer hohen Vergrößerung vor dem Projektiv angebracht ist und das Beugungsbild damit stark verkleinert wird. Die geschilderten Methoden sind im MANDOLINEN-Filter [Uhlemann 1994] zumindest theoretisch realisiert. Eine sub-eV Energieauflösung ist möglich.

Durch die Einführung eines Energiefilters erhöhen sich die Anforderungen an das Projektionssystem. Das Projektionssystem muß in der Lage sein, sowohl die achromatische Bildebene des Filters als auch die Energieselektionsebene – in der ein durch Dispersion auseinandergezogenes Beugungsbild des Objektes liegt – mit variabler Vergrößerung in die Kameraebene abzubilden (s. Kap. 2.2). Da man bei der Abbildung des Energieverlustspektrums in der Energieselektionsebene nur an der Intensitätsverteilung in Dispersionsrichtung interessiert

ist, sollte die Abbildung nach Möglichkeit nur in dieser Richtung erfolgen. Die Intensitätsverteilung des Spektrums sollte hingegen in der dazu senkrechten Richtung über die gesamte Breite der CCD-Kamera verteilt werden. Auch bei einer elementspezifischen Abbildung des Objektes muß die Richtung der Dispersion besonders berücksichtigt werden. Solche anisotropen Abbildungsmodi lassen sich nur mit Hilfe von Quadrupolfeldern realisieren. Das Projektiv darf zum einen den Hochauflösungsmodus des Mikroskops mit Öffnungsfehlerkorrektur nicht beeinträchtigen, muß aber zum anderen genauso Übersichtsbilder und Energiespektren mit hoher Energieauflösung und variablen Energiefenstern übertragen können. Dies erfordert einen variablen Vergrößerungsbereich der für die sub-Å sub-eV Auflösung optimiert ist, sowie hinreichend kleine Aberrationen. In Kap. 4 werden verschiedene Quadrupolanordnungen vorgestellt, die diese Anforderungen mit möglichst wenigen Elementen erfüllen.

Die Aberrationen der Systeme wurden mit Hilfe der in Kap. 3 kurz vorgestellten Methode der sukzessiven Approximation berechnet. Weiterhin werden dort Näherungsmethoden für eine analytische Berechnung der Teilchenbahnen beschrieben, so daß eine effiziente Optimierung der Abbildungseigenschaften verschiedener optischer Systeme möglich wird.

Im Laufe der Zeit sind sehr viele Energiefilter untersucht worden. Durch die mittlerweile verwendete hohe Beschleunigungsspannung im Mikroskop (> 200 kV) ist die Verwendung elektrischer Felder wegen der notwendigen unrealistischen Feldstärken ungeeignet. Durchgesetzt haben sich daher Energiefilter mit reinen magnetischen Umlenkern. Für Niederspannungselektronenmikroskope sind allerdings auch andere Anordnungen denkbar. In Kap. 5 wird ein abbildendes Energiefilter für den Niederspannungsbereich vorgestellt. Das Filter besitzt eine gerade optische Achse und wird als Wien-Filter bezeichnet. Der Vorschlag eines solchen Filters geht auf [\[Rose 1987a\]](#) zurück. Die Abbildungseigenschaften bis einschließlich zweiten Ranges werden mit einem realistischen Feldmodell berechnet.

Kapitel 2

Eigenschaften von abbildenden Energiefiltern und Projektionssystemen

Die Gründe für die Verwendung von Energiefiltern in Elektronenmikroskopen liegen in dem Wunsch nach einer möglichst vollständigen Information über das Objekt. Durch den Einsatz von Energiefiltern wird zusätzlich die spektroskopische Information zugänglich. Außerdem kann man Energieverlustspektren, Elementverteilungsbilder und elementspezifische Beugungsbilder aufnehmen.

Eine knappe historische Übersicht über den Einsatz von Energiefiltern in Transmissionselektronenmikroskopen ist in [Degenhardt 1992] dargestellt. Die Entwicklung schritt von dem ersten kommerziell eingesetzten Castaing-Filter mit elektrostatischem Spiegel hin zu den α - und Ω -Filtern mit reinen magnetischen Umlenkern. In dieser Arbeit werden vorwiegend Ω -Filter nach [Rose, Plies 1974], [Lanio 1986] und [Uhlemann 1994] betrachtet.

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels werden die Anforderungen und Betriebsarten von Energiefiltern in einem Transmissionselektronenmikroskop diskutiert. Die Einstellung des Mikroskops wird skizziert und damit die elektronenoptischen Eigenschaften eines Energiefilters festgelegt. Im zweiten Abschnitt werden daraus die Eigenschaften für nachfolgende Projektionsysteme definiert.

2.1 Abbildende Energiefilter

Transmissions-Elektronenmikroskope mit abbildenden Energiefilter können zur Aufnahme von energiegefilterten Bildern und Beugungsbildern sowie des Energieverlustspektrums verwendet werden. Eine systematische Übersicht über diese und weitere denkbare Methoden für die Untersuchung der Wechselwirkung eines Festkörpers mit schnellen Elektronen findet sich z. B. in [Hofer 1990]. Folgende für die Elektronenmikroskopie wichtigen Untersuchungsmethoden des Objektes werden hier diskutiert. Dabei werden die Definitionen

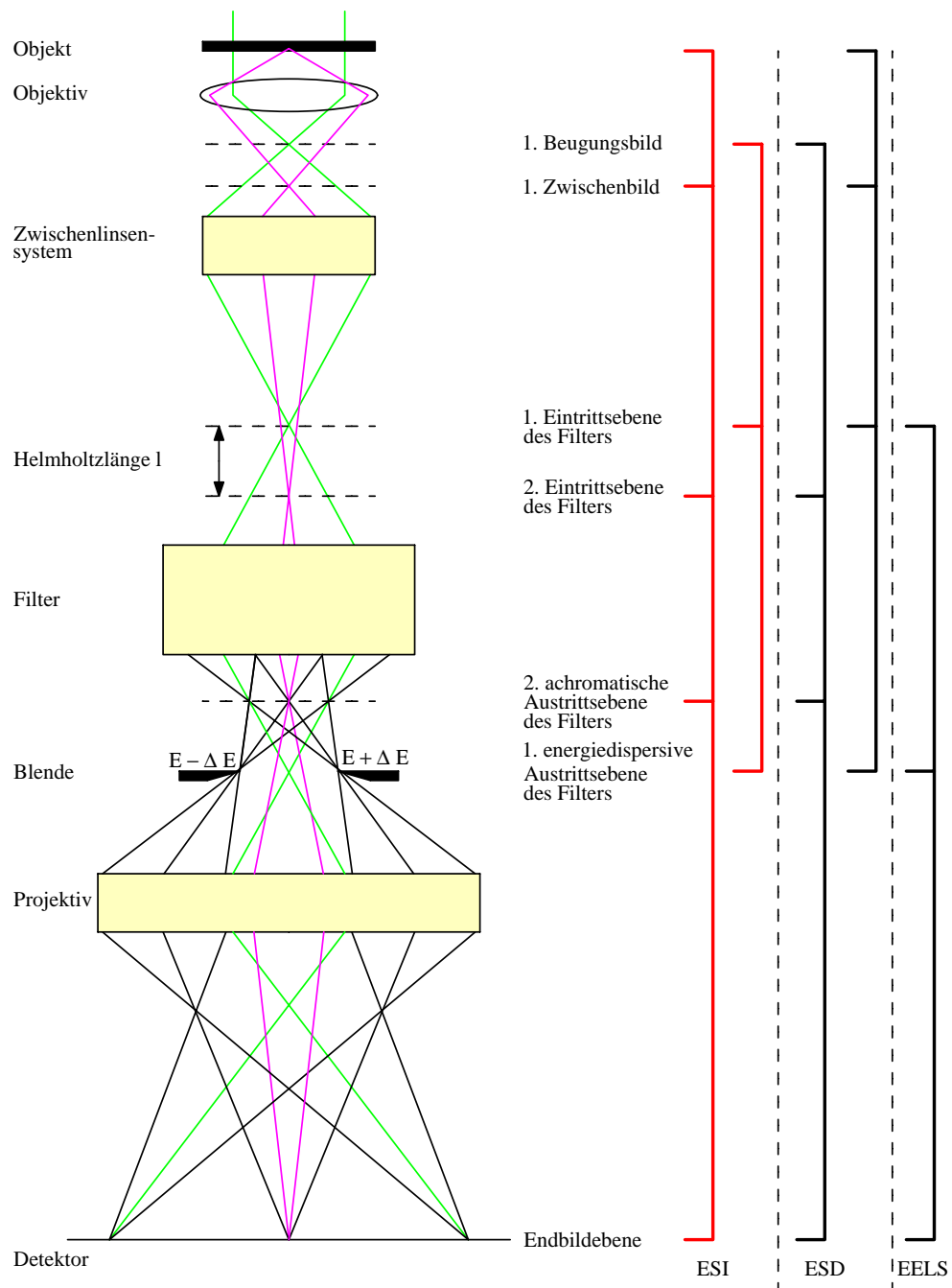


Abbildung 2.1: Eine schematische Darstellung für eine Abbildung des Objektes in einem EFTEM.

— Feldbahnen, — Bahnen mit vom Filter selektierter Energieabhängigkeit, — axiale Bahnen.

- „Ebene“ (Fläche senkrecht zur optischen Achse)
- „Schnitt“ (Fläche, die die optische Achse enthält)

benutzt, die auch in den gesamten nachfolgenden Ausführungen beibehalten werden.

Die klassische und wohl immer noch wichtigste Untersuchungsmethode ist die Mikroskopie mit elastisch gestreuten Elektronen ohne Energieverlust im Objekt. Da die Objektivlinse mit einem axialen Farbfehler behaftet ist, war es zuvor nicht möglich, gute Auflösungen zu erzielen. Mit einem Energiefilter und kleinen Energiefenstern läßt sich der Einfluß des Farbfehlers einschränken, da jetzt alleine elastisch gestreute Elektronen für den Kontrast im Endbild verantwortlich sind. Der schematische Strahlengang ist in **Abb. 2.1** zu erkennen. Das Filter wird so eingestellt, daß ein Beugungsbild in der Energieselektionsebene, erste Austrittsebene des Filters, liegt. Auf diese Weise läßt sich das Zwischenbild in der zweiten Austrittsebene des Filters achromatisch einstellen. Die farbabhängigen Bahnen nach dem Filter sind in **Abb. 2.1** als schwarze Linien dargestellt.

Mit der gleichen Einstellung des Mikroskop in **Abb. 2.1**, aber großen Energiefenstern, lassen sich die unelastisch gestreuten Elektronen des Objektes zur Abbildung nutzen. Während im vorigen Fall die Null-Energieverlustelektronen zur Abbildung genutzt wurden, kommen hier vor allem Elektronen zur Anwendung, die Wechselwirkungen mit dem Plasmonpeak des Festkörpers erfahren haben. Nach [Hofer 1990] sollten dazu sehr große Energiefenster ($2\Delta E = 40 \text{ eV}$) gewählt werden.

Weiterhin läßt sich der Abbildungsbetrieb des Mikroskops aus **Abb. 2.1** dazu benutzen, Elementverteilungsbilder zu erstellen. Dazu muß das Energiefenster auf die entsprechende Ionisationskante des gewünschten Elementes gesetzt werden, um nur an diesem Element unelastisch gestreute Elektronen für den Kontrast im Endbild zu benutzen. Um den Untergrund und Elektronen des Plasmonpeaks dabei zu entfernen, müssen Differenzbilder mit benachbarten Energiefenstern gebildet werden. Im folgenden wird dieser Abbildungsmodus ESI (Element Specific Imaging) genannt werden. Da sich die beiden genannten Verfahren der Abbildung des Objektes mit elastisch bzw. unelastisch gestreuten Elektronen nur durch die Größe des Energiefensters unterscheiden, wird für die Berechnung der Abbildungseigenschaften des Projektivsystems der Kürze halber nur dieses Verfahren, dafür aber mit verschiedenen Energiefenstern, besprochen.

Alle drei oben genannten Verfahren lassen sich auch zur Aufnahme von Beugungsbildern benutzen. Man unterscheidet dabei Beugungsbilder mit ausschließlich elastisch gestreuten Elektronen, was zu einer Kontrasterhöhung der Bragg-Reflexe führt, und ESD (Element Specific Diffraction) mit den unelastisch gestreuten Elektronen, in denen elementspezifische Aussagen über die Winkelverteilung möglich sind. In **Abb. 2.1** muß das Zwischenlinsensystem hier so erregt werden, daß in der ersten Eintrittsebene des Filters jetzt ein Bild des Objektes und in der zweiten Eintrittsebene des Filters ein Beugungsbild zu liegen kommt. Im Vergleich zur Einstellung bei ESI werden die beiden Ebenen demnach vertauscht.

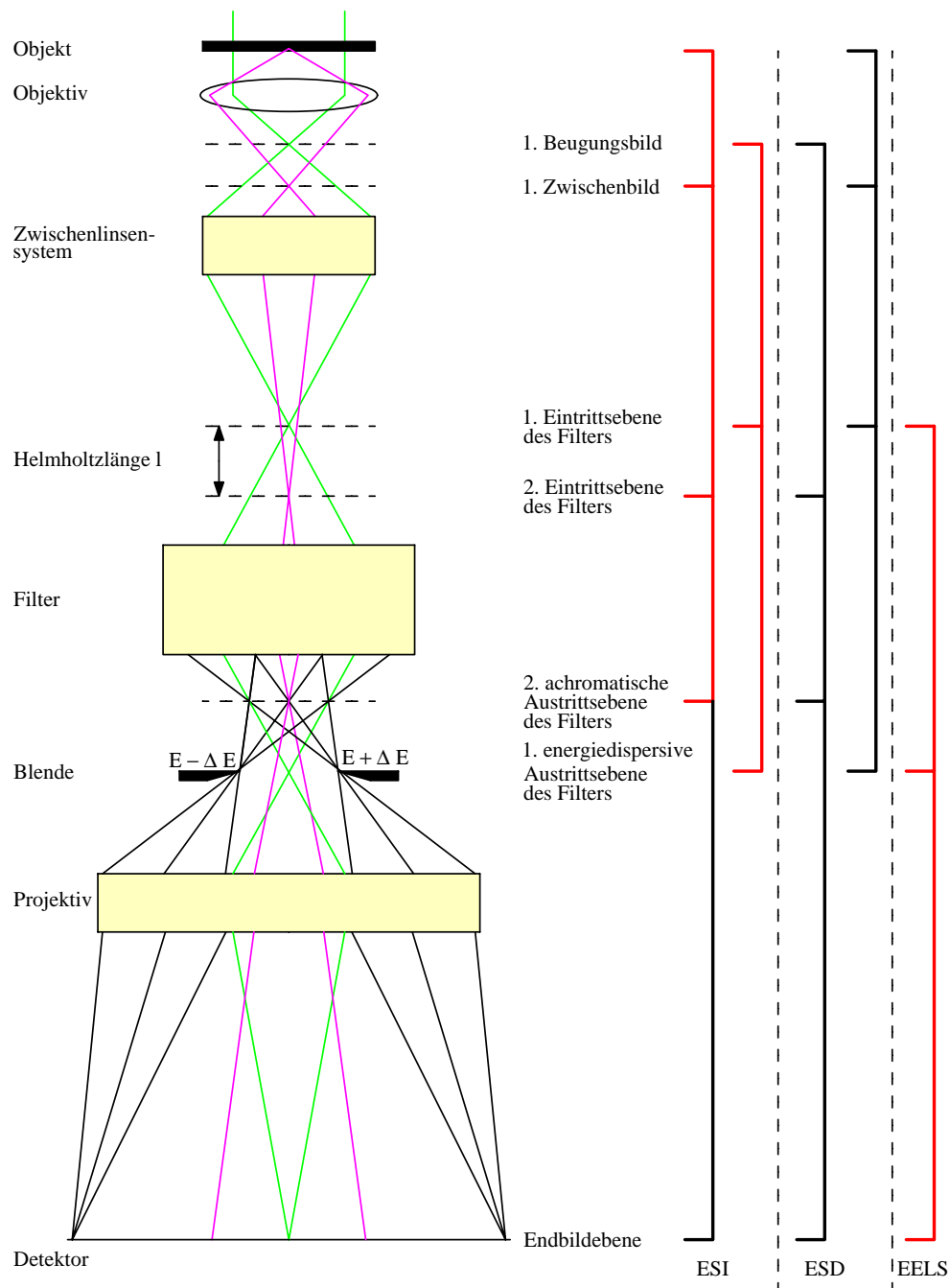


Abbildung 2.2: Eine schematische Darstellung für eine Abbildung des Energieverlustspektrums in einem EFTEM.

— Feldbahnen, — Bahnen mit vom Filter selektierter Energieabhängigkeit, — axiale Bahnen.

Das letzte hier genannte Verfahren ist die Elektronen–Energieverlust Spektroskopie EELS (Electron Energy Loss Spectroscopy). Die Einstellung des Mikroskops ist in **Abb. 2.2** dargestellt. Das Projektiv muß so erregt werden, daß die erste Austrittsebene des Filters mit dem Energiespektrum in die Endbildebene abgebildet wird. Für die Untersuchung solcher Spektren ist zunächst die Übertragung großer Energiefenster wichtig, um die Lage der oben erwähnten Ionisationskanten zu bestimmen (Übersichtsspektren). Zusätzlich kann auch die alleinige Untersuchung einer Ionisationskante mit kleinen Energiefenstern für die Messung der kantennahen und kantenfernen Strukturen dieser Ionisationskante nützlich sein. Mit diesen Feinbereichsspektren können z. B. Atomabstände und chemischer Bindungszustand des angeregten Atoms bestimmt werden. Nach [Hofer 1990] läßt sich dies als „Fingerabdruck“ für das jeweilige Atom verwenden.

2.2 Projektionssysteme im Anschluß an abbildende Energiefilter

Die hier betrachteten Projektivsysteme folgen im Anschluß an die in der Einleitung aufgeführten Ω –Filter. Der Strahlengang solcher Filter ist in **Abb. 2.3** dargestellt. Andere mögliche Strahlengänge sind das Wien–Filter nach [Rose 1987a] oder die α –Filter [Degenhardt 1992] mit teleskopischem Strahlengang, so daß entweder das Bild oder das Beugungsbild im Unendlichen liegt. Eine weitere Möglichkeit besteht in Energiefiltern mit integriertem Projektiv [Gubbens 1998]. Das zuletzt genannte Filter besitzt aber weder eine geradsichtige optische Achse, noch benutzt es einen symmetrischen Strahlengang für eine Korrektur der Bildfehler.

In dieser Arbeit werden Projektivsysteme mit dem eintretenden Strahlengang aus **Abb. 2.3** betrachtet, der sich aus **Abb. 2.1** ablesen läßt. Wesentliches Merkmal aller abbildender Energiefilter ist die achromatische Bildebene. Sie trägt der in der Einleitung getroffenen Feststellung Rechnung, daß für Abbildungen des Objektes mit großen Energiefenstern keine sichtbaren Unschärfen, verursacht durch die Dispersion des Filters (Farbfehler ersten Ranges), erkennbar sind. In **Abb. 2.3** ist eine solche Ebene durch die gemeinsame Nullstelle der axialen Bahn x_α und der dispersiven Bahn x_κ im xz –Schnitt festgelegt. Aus diesem Grund unterscheiden sich die beiden Bahnen nur durch den Faktor

$$\frac{E_0 \mathcal{D}}{l} \quad (2.1)$$

auf die axiale Bahn, wobei $E_0 = e U$ die Sollenergie der Elektronen, \mathcal{D} die Dispersion des Filters und l die Helmholtzlänge bedeuten. Die Helmholtzlänge ist dabei der Abstand der achromatischen Bildebene zu der Energieselektionsebene. Die Vergrößerung M_z gibt die Gesamtvergrößerung bis zur achromatischen Bildebene des Filters an; die Größen $x_{Obj}, y_{Obj}, \alpha_0, \beta_0, \kappa = \Delta E/E_0$ geben den fünfdimensionalen Spurenraum (Phasenraum) [Rose 1995] der Elektronenverteilung aus Objektkoordinaten, Winkel– und Energieabhängigkeit der Elektronenstreuung im Objekt an. Da die x_α –Bahn und die x_κ –Bahn nach den hier erfolgten Darstellungen linear abhängig sind und durch die Zwischenvergrößerung M_z

die axiale Bahn x_α sehr stark verkleinert wird (**Abb. 2.3**), wird in den nachfolgenden Abbildungen über Projektionssysteme nur die dispersive Bahn x_κ eingezeichnet. In einem Transmissionselektronenmikroskop ist die Gesamtvergrößerung in etwa 1×10^5 . Die lineare Abhängigkeit läßt sich auch zur Kontrolle einiger höherer Bildfehler nutzen, die ebenfalls linear abhängig sein müssen. Die starke Verkleinerung der Aperturwinkel α_0, β_0 in einem Mikroskop und demzufolge die gewünschte Vergrößerung der Objektkoordinaten x_0, y_0 durch die Zwischenvergrößerung M_z ist in **Abb. 2.3** in der achromatischen Bildebene eingezeichnet. Die Objektkoordinaten werden auf die Energieselektionsebene, die in diesem Fall auch eine Beugungsebene ist, bezogen. Die Umrechnung in die Größen γ, δ ist aus der Abbildung zu entnehmen. Im Folgenden werden die dimensionslosen Größen $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ und κ benutzt. Die physikalische Bedeutung der Ebenen in **Abb. 2.3** ist auf die Einstellung des Mikroskops für den Fall ESI ausgerichtet.

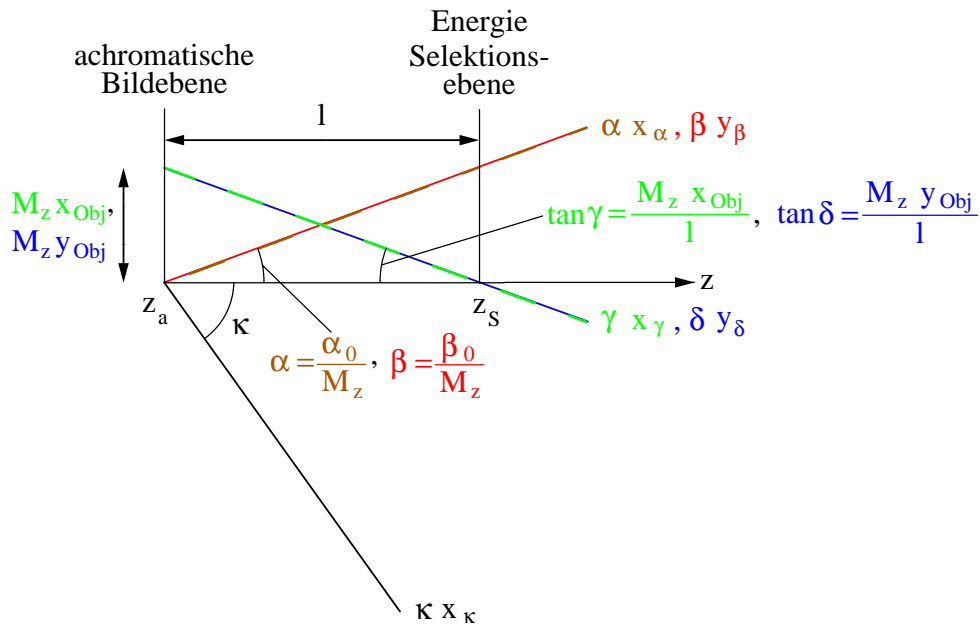


Abbildung 2.3: Eine schematische Darstellung der Bahnen und Austrittsebenen hinter dem Filter.

In den **Abbn. 2.1, 2.2** und **2.3** ist eingezeichnet, daß in der ersten energiedispersiven Austrittsebene des Filters (Energieselektionsebene) in den meisten Fällen gleichfalls ein Bild des ersten Beugungsbildes (Lage der Apertur) vorliegt. Die Ausnahme ist dabei die Methode ESD, in der ein Bild des Objektes in der Energieselektionsebene vorliegt. In beiden Fällen läßt sich durch die hohe Zwischenvergrößerung eine Vignettierung, d. h. eine Richtungsabhängigkeit in der nachfolgenden Abbildung, durch den Energieselektionsschlitz vermeiden. Die Größe des Energiefensters kann allerdings nicht beliebig klein gewählt werden. Für eine Abbildung des Energiespektrums (EELS) muß die Energieselektionsebene in das Endbild abgebildet werden, so daß prinzipiell das Beugungsbild die gewünschte Energieauflösung

einschränkt. Da im Mikroskop gewöhnlich eine starke Verkleinerung des Beugungsbildes erfolgt, sind trotzdem gute Energieauflösungen zu erreichen. In den bisherigen Skizzen wurde die ideale Abbildung eingezeichnet. Abweichungen von dieser idealen Abbildung, die Bildfehler, wurden nicht berücksichtigt. Es ist sinnvoll, das entstehende Fehlerscheibchen in gleicher Größe zu der des abgebildeten Beugungsbildes zu wählen. Für das Energiefilter läßt sich so eine optimale Zwischenvergrößerung $M_{z,opt}$ berechnen. Für ein Projektivsystem mit vorgewählter Vergrößerung kann eine optimale Apertur α_{opt} berechnet werden. Ist die gewählte Apertur größer als α_{opt} , begrenzt das Beugungsbild die Energieauflösung. Andernfalls ist das resultierende Fehlerscheibchen der Bildfehler dominant. In keinem Fall darf das Energiefenster kleiner als das Beugungsbild in der Energieselektionsebene gewählt werden.

Für die Berechnung der Energieauflösung im Falle der Elektronen–Energieverlustspektroskopie bezieht man sich am günstigsten auf die Energieselektionsebene. Da eine dispersive Bahn x_k nur im xz –Schnitt vorliegt, müssen nur Größen in diesem Schnitt betrachtet werden. Nach **Abb. 2.3** beträgt die Größe des Beugungsbildes

$$\Delta x_{Ap} = \alpha l \quad , \quad (2.2)$$

bzw. mit Hilfe der Dispersion des Filters \mathcal{D} die Energieauflösung des Beugungsbildes

$$\delta E_{Ap} = \frac{\Delta x_{Ap}}{\mathcal{D}} = \frac{\alpha l}{\mathcal{D}} \quad . \quad (2.3)$$

Beträgt die Größe des Fehlerscheibchens δx , so kann auch dieses in die Energieauflösung

$$\delta E_{Ab} = \frac{\delta x}{\mathcal{D}} \quad (2.4)$$

umgerechnet werden. Die zuvor definierte optimale Apertur α_{opt} ergibt sich aus der Bedingung

$$\delta E_{Ab} = \delta E_{Ap} \quad . \quad (2.5)$$

Mit Hilfe einer solchen Energieauflösung läßt sich die Abbildung des Spektrums optimieren. In modernen energiefilternden Transmissionselektronenmikroskopen (EFTEM) mit einem Monochromator direkt hinter der Elektronenquelle sollte die Energieauflösung kleiner als $\delta E = 0.2 eV$ sein. Dann werden Untersuchungen der unelastischen Elektronenstreuung am Objekt nicht durch das Energiefilter oder das Projektivsystem beeinträchtigt.

Im vorigen Abschnitt wurden in den **Abbn. 2.1** und **2.2** die Aufgaben eines Projektiv nach einem Energiefilter im wesentlichen auf die elementspezifische Abbildung und die Übertragung des Energieverlustspektrums insofern reduziert, daß alle notwendigen Abbildungen behandelt werden. In diesen Skizzen ist zu erkennen, daß dabei jeweils entweder die achromatische Bildebene (ESI) oder die Energieselektionsebene (EELS) von einem Projektiv abgebildet werden muß.

Die elementspezifische Abbildung der achromatischen Bildebene ist die Standardübertragung eines Projektivs. Die erforderliche Vergrößerung ist im xz – und im yz –Schnitt gleich und gibt die Vergrößerung der achromatischen Bildebene an. Eine variable Vergrößerung ist

hier zum einen dadurch erforderlich, daß man sich Übersichtsbilder mit niedriger Vergrößerung und hochaufgelöste Bilder mit großer Vergrößerung beschaffen möchte. Zum anderen ist in Skizze **Abb. 2.1** zu erkennen, daß auch elementspezifische Beugungsbilder (ESD) übertragen werden sollen, die eine niedrige Vergrößerung erfordern. Ein Projektivsystem hinter einem abbildenden Energiefilter muß demnach die Übertragung der achromatischen Bildebene mit variabler Vergrößerung bei gleich guten Abbildungsparametern, wie z. B. Bildfehler, ermöglichen.

Die Elektronen–Energieverlust–Spektroskopie erfordert eine Abbildung der Energieselektionsebene (1. energiedispersive Austrittsebene des Filters, s. **Abb. 2.2**) für das Projektivsystem im Anschluß an ein Filter. Für diesen Fall wurde im vorigen Abschnitt erarbeitet, daß verschiedene Energiefenster zur Untersuchung des Objektes erforderlich sind. Große Energiefenster dienen zur Übersicht über das Energieverlustspektrum und ermitteln die Lagen der Ionisationskanten und kleine Energiefenster geben Aufschluß über die Feinstruktur der einzelnen Ionisationskanten. Aus den dargelegten Gründen wird vor allem auf die Energiefenster $\Delta E = 60, 200, 300, 500$ eV Wert gelegt. Fenster größer als 500 eV sind wegen der auftretenden Farbfehler nur sehr schwer realisierbar. Variable Energiefenster bedeuten für das Projektiv die Bereitstellung einer variablen Vergrößerung der Energieselektionsebene im xz –Schnitt. Aus **Abb. 2.3** läßt sich dafür die Formel für die Vergrößerung im xz –Schnitt

$$V_x = \frac{x_{Det}}{\Delta E \mathcal{D}} \quad (2.6)$$

anhand der dispersiven Bahn x_κ ablesen. Dabei ist x_{Det} die Hälfte der Breite des genutzten Detektors. Im yz –Schnitt muß nur darauf geachtet werden, daß die Breite des Elektronenbündels nicht den Detektor überschreitet. Dies wird in Kap. 4 ausgenutzt. Die hier behandelten Filter stellen die Energiedispersion nur in einem Schnitt bereit und somit muß nur dieser im Falle der Spektroskopie abgebildet werden. Der Detektor sollte im yz –Schnitt aufgrund der starken Intensitätsunterschiede im Energiespektrum mindestens zu 50% ausgeleuchtet werden, um eine Sättigung zu vermeiden.

Projektivsysteme im Anschluß an abbildende Energiefilter unterscheiden sich von bisherigen Projektivsystemen in Transmissionselektronenmikroskopen ohne Filter vor allem durch die zusätzliche dispersive Bahn. Dadurch gehört ein vollständig neuer Übertragungsmodus zu den Anforderungen eines Projektivsystems, die Elektronen–Energieverlust–Spektroskopie. Nach den bisherigen Überlegungen erfolgt die angepaßteste Abbildung dabei **astigmatisch**, da ein Beugungsbild in einem TEM eben stark verkleinert wird und demzufolge ein Punkt der energiedispersiven Ebene (einem Beugungsbild) in einen Strich in der Endbildebene abgebildet werden sollte. Weiterhin ist in allen Fällen zu beachten, daß die dispersive Bahn zu zusätzlichen Bildfehlern führt. War es zuvor alleine wichtig in Projektiven die Verzeichnung und den Farbfehler der Vergrößerung zu korrigieren [[Riecke 1982](#)], sind jetzt alle Bildfehler, die vom Objektbereich und dem Energieverlust abhängen, dominant. Die Bildfehlerdiskussion wird dadurch erheblich komplizierter.

Die schon erwähnte lineare Abhängigkeit der axialen Bahn x_α und der dispersiven Bahn x_κ ließe sich für eine Korrektur der dominanten Bildfehler nutzen. So schlägt Rose Aplanate vor

[Rose 1971], die sich für eine Farb- und Öffnungsfehlerkorrektur einer Frontlinse eignen. In einem Projektivsystem ist allerdings eine variable Vergrößerung erforderlich, das dadurch mehr als eine Frontlinse benötigt. Auch ein solches System könnte mit Hilfe eines Aplanators korrigiert werden, solange die Hauptebenen und die Bildfehler des Rundlinsensystems und des Aplanators für jede Vergrößerung aneinander angepaßt würden. Ein solches Rundlinsensystem müßte zudem verdrehungsfrei abbilden, da der Aplanat die anisotropen Fehler nur sehr schwer korrigieren kann [Rose 1971]. Der Aplanator sieht teilweise kombinierte elektrische und magnetische Elemente vor, da er für $U = 60$ kV Säulenspannung vorgeschlagen wurde. In einem TEM ab einer Säulenspannung von $U = 200$ kV sind elektrische Felder aufgrund der großen Feldstärken nur sehr schwer zu verwirklichen [Uhlemann 1995]. Das resultierende System würde eine große Zahl von Elementen aufweisen. So besteht der von Rose vorgeschlagene Aplanator aus dem Rundlinsensystem und sieben Elementen, auf denen teilweise neben den Quadrupolen auch noch Oktopole erregt werden. Für ein Projektivsystem als letztem elektronenoptischen Element, für das zudem noch die Säulenlänge durch die Gesamtlänge des Mikroskops beschränkt ist, möchte man einen so großen Aufwand vermeiden. In dieser Arbeit wird besonderen Wert darauf gelegt, möglichst wenig Elemente für eine variable Vergrößerung mit fester Bild- und Gegenstandsebene zu verwenden. Dabei wird das nachfolgend beschriebene Konzept genutzt.

Wie dargestellt wurde, sind an ein Projektivsystem viele Anforderungen zu stellen. Für eine Abbildung im sub-Å Bereich bei Mikroskopen mit Öffnungsfehlerkorrektor muß ein relativ kleines Bildfeld im gesamten Mikroskop sehr stark vergrößert werden, so daß eine große Apertur erforderlich ist, um genügend Intensität zu erhalten. Das Energiefenster hingegen sollte dabei so klein wie möglich sein. Für die elementspezifische Abbildung ist ein großer Objektbereich mit niedriger Gesamtvergrößerung für ausreichende Intensität sowie ein breites Energiefenster wegen der geringeren Intensität des Energieverlustspektrums im Plasmonpeak bzw. in der Ionisationskante notwendig. Dies gilt auch für die Energieverlustspektroskopie. Demzufolge muß die Akzeptanz des Projektivs an die Emittanz der vorausgehenden Elemente angepaßt werden [Rose 1995]. Dies bedeutet nichts anderes als den Spurenraum bzw. Phasenraum aneinander anzupassen. Ziel kann demnach nur sein, eine möglichst große Akzeptanz bei einer hohen Dispersion zu erreichen [Rose 1999, Krivanek 1995]. Nach den Gleichungen (2.3) und (2.4) bedeutet eine hohe Dispersion eine gute Energieauflösung und nach Gleichung (2.6) eine niedrige Endvergrößerung des Projektivs im xz -Schnitt für die Abbildung des Energiespektrums. Vor allem für die elementspezifische Abbildung läßt sich für eine Maximierung der Akzeptanz ausnutzen, daß diese für jeden Schnitt getrennt betrachtet werden kann [Rose 1995]. Dieses Vorgehen ist für eine gerade optische Achse nur mit Hilfe von Quadrupolfeldern durchführbar, genauso wie eine astigmatische Abbildung und eine Maximierung der Akzeptanz im Falle der Energieverlustspektroskopie. Die Abb. 2.4 zeigt schematisch eine mögliche elementspezifische Abbildung mit Quadrupolen.

Typische Bildfelder in der achromatischen Bildebene haben einen Durchmesser von 1 mm und eine Apertur im ersten Beugungsbild von $\alpha_0 = 10$ mrad. Die hier berücksichtigten Filter sind das MANDOLINE Filter [Uhlemann 1994] mit einer Dispersion von $\mathcal{D} = 6.2 \frac{\mu\text{m}}{\text{eV}}$ und das 90°-Filter [LEO] mit einer Dispersion von $\mathcal{D} = 1.9 \frac{\mu\text{m}}{\text{eV}}$ bei 200 kV Säulenspannung.

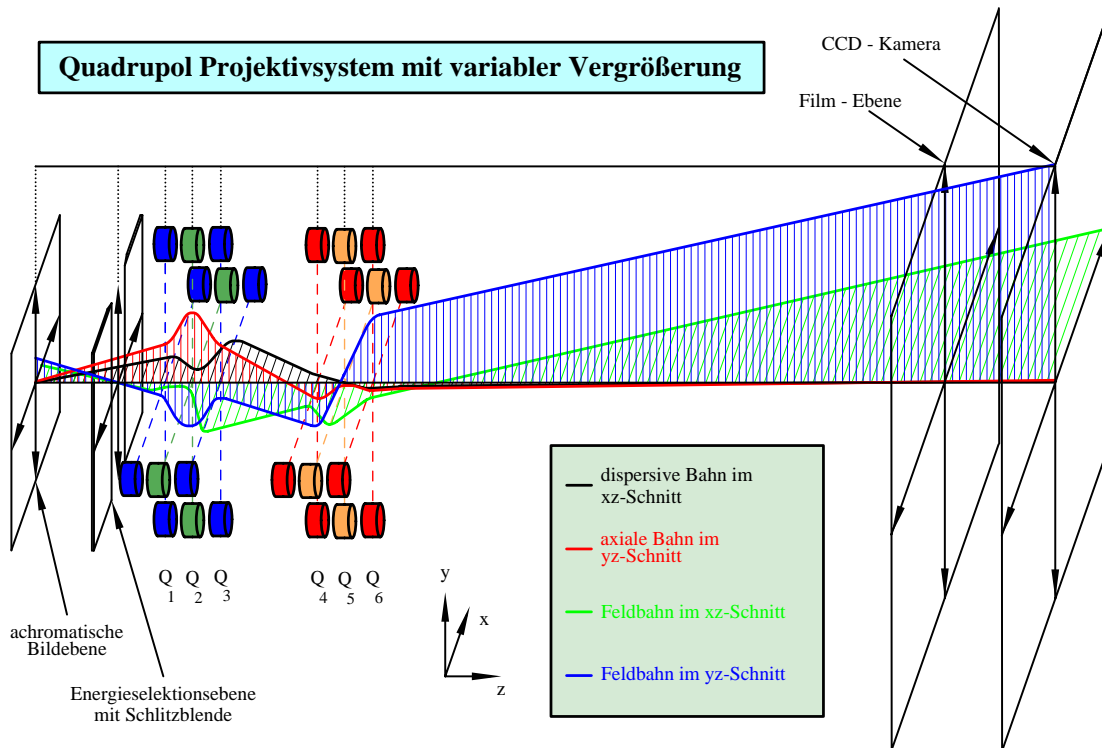


Abbildung 2.4: Eine schematische Darstellung für eine stigmatische Abbildung der achromatischen Bildebene mit Quadrupolen.

Da das Projektiv das letzte Element des Mikroskops ist, sollten auch Eigenschaften des Detektors berücksichtigt werden. Zum einen bestimmt die Breite des Detektors den Wert der Endvergrößerung des Projektivs. Zum anderen sollte die Größe des Fehlerscheibchens nicht die Größe von zwei bis drei Pixeln des verwendeten Detektors überschreiten. Ein Pixel zu fordern ist nicht sinnvoll, da die benachbarten Pixel meist mit angeregt werden. Die am meisten gebräuchlichsten Detektoren sind ein Film und eine CCD-Kamera. Der Film hat etwa eine Korngröße von $1 \dots 10 \mu m$, je nach gewünschter Empfindlichkeit des Films. Die Kanalgröße einer CCD-Kamera liegt in einem Bereich von etwa $15 \dots 25 \mu m$.

Kapitel 3

Abbildungseigenschaften teilchenoptischer Systeme

In diesem Kapitel werden die Grundlagen zur Berechnung teilchenoptischer Systeme geschildert.

Der Versuch, Begriffe der Lichtoptik als Analogieschluß auf geladene Teilchen zu übertragen, geht auf den Anfang dieses Jahrhunderts zurück. Im Jahr 1924 postulierte L. de Broglie Materiewellen [de Broglie 1927], d. h. er ordnete jedem Teilchen eine Wellenlänge zu. Eine weitere Entdeckung war notwendig, um fokussierende Elemente wie in der Lichtoptik, beispielsweise Glaslinsen zu erhalten. Dieses Experiment zur Fokussierung mit Elektronen gelang im Jahr 1926 H. Busch [Busch 1927] mit dem Magnetfeld einer rotationssymmetrischen Spule. Daraufhin wurde die Entwicklung von Elektronenmikroskopen durch E. Ruska und die Beschleunigerphysik möglich.

Auch weiterhin wurde das Vorgehen in der Lichtoptik auf die Teilchenoptik übertragen. Das Ziel, solange wie möglich analytisch zu rechnen wurde verfolgt, um allgemeine Aussagen über die Charakteristik von Abbildungssystemen zu erhalten. Die Seidel'sche Methode in der Lichtoptik, das zu übertragende Bündel nach Bahnparametern zu entwickeln, wurde in der Teilchenoptik übernommen. Dieses Vorgehen hat den Vorteil, jede Ordnung getrennt voneinander zu behandeln. Vor allem bei der Berechnung der störenden Bildfehler, deren Klassifizierung und Korrektur, erweist sich dieses analytische Verfahren als nützlich. Als eine Erweiterung zur Lichtoptik wird in der Teilchenoptik eine beliebig gekrümmte Achse, die in vielen Fällen auch Teilchenbahn ist, eingeführt. Die dazu notwendige Entwicklung um diese Achse, die Einführung eines mitgeführten lokalen orthogonalen Koordinatensystems und die Lösung der Laplacegleichung in der Metrik dieses angepaßten Koordinatensystems, ist ausführlich in [Plies, Rose 1971] dargestellt. Da in dieser Arbeit nur Systeme mit *gerader Achse* betrachtet werden, wird hier auf eine Behandlung von Systemen mit resultierender lateraler Kraftwirkung auf Teilchen, deren Bahn mit der optischen Achse zusammenfällt, verzichtet.

Die Seidel'sche Theorie der Entwicklung eines Strahlenbündels ist rein geometrisch aufzu-

fassen. In diesem Abschnitt wird vornehmlich auf die Berechnung von Brennebenen, Bildebenen und Bildfehlern, d. h. die *optischen* Eigenschaften eines Systems, eingegangen. Effekte durch Beugung an Öffnungen werden nicht berücksichtigt. Des weiteren beschränkt sich die Teilchenoptik auf die Behandlung von *makroskopischen* elektromagnetischen Feldern. Diese sollen als Felder verstanden werden, bei denen sich die Feldstärke innerhalb einer Wellenlänge des Teilchens nur unmerklich ändert. Als Beispiel hierfür dient die oben erwähnte rotationssymmetrische Spule von H. Busch. Wechselwirkungen der geladenen Teilchen mit den atomaren Feldern des Objektes können in dieser Theorie nicht behandelt werden. Dazu ist notwendig, die Wechselwirkung als quantenmechanischen Streuprozess zu begreifen.

Die folgenden Ausführungen beschränken sich auf Elektronen. Sollen andere geladene Teilchen, wie zum Beispiel Ionen betrachtet werden, ist lediglich die jeweilige Ladung und Masse des Teilchens in den Rechnungen zu ersetzen.

In der geschichtlichen Entwicklung dieser Theorie wurde wieder in Analogie zur Lichtoptik ein Brechungsindex eingeführt. Dies soll in folgendem Abschnitt kurz dargelegt werden.

Der anschließende Abschnitt beschäftigt sich mit der Entwicklung des elektromagnetischen Feldes in Potenzen des Achsabstandes. Dieser Abschnitt ist grundlegend für eine weitergehende Theorie einer Entwicklung der Elektronenbahnen, da elektrisch geladene Teilchen mit elektrischen bzw. magnetischen Feldern fokussiert werden sollen.

Anschließend wird dann das Bewegungsproblem mit den bisher vorgestellten Mitteln behandelt. Zunächst wird konkret die Entwicklung des Brechungsindex dargestellt, um danach eine Klassifizierung der Entwicklungsordnungen festzulegen. Eine ausgezeichnete Rolle wird die lineare Näherung spielen. Dort wird die ideale Abbildung definiert. Vergewahrtigt man sich die Rolle einer Vergrößerung eines Bildes wird deutlich, warum dies eine lineare Beziehung erfordert. Höhere Ordnungen behandeln die Berechnung von Bildfehlern.

Zur genauen Berechnung von Teilchenbahnen ist die Kenntnis der elektromagnetischen Felder erforderlich. Dazu müssen Lösungen der Laplacegleichung gefunden werden. In dieser Arbeit sollen dazu zuerst ein analytisches und danach ein semianalytisches Modell geschildert werden. Als Schlußfolgerung daraus ergeben sich einfach zu berechnende Beziehungen zur Abschätzung der Potentiale bzw. Ampèrewindungen auf speziellen Anordnungen von Elektroden oder Polschuhen.

Zum Abschluß dieses Kapitels wird nochmals auf die lineare Näherung eingegangen, indem das Feldmodell darauf angepaßt wird. Ziel dieses Gedankenganges ist die einfachste analytische Lösung der linearisierten Bewegungsgleichungen. Damit lassen sich Bedingungen für eine Abbildung in allgemeinsten Form angeben und somit die optischen Eigenschaften flexibel festlegen.

3.1 Grundlagen

Die Bewegungsgleichungen in der Mechanik werden mit Hilfe der Wirkungsfunktion W bestimmt. Nach dem Hamiltonschen Prinzip ergibt sich die Bahn eines Teilchen zwischen zwei festen Punkten $\mathbf{r}(t_0)$ und $\mathbf{r}(t_1)$ als diejenige Bahn, für die die Wirkungsfunktion einen Extremalwert

$$W = \text{Extr.} \int_{t_0}^{t_1} L(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) dt \quad (3.1)$$

annimmt. Die relativistische Lagrangefunktion ist für ein Elektron durch die Gleichung

$$L = -m_0 c^2 \sqrt{1 - \beta^2} + e\varphi - e\mathbf{A}\mathbf{v}, \quad \beta = \frac{v}{c} \quad (3.2)$$

gegeben. Hier bedeuten $-e$ die Elementarladung, m_0 die Ruhemasse und \mathbf{v} die Geschwindigkeit des Elektrons sowie c die Lichtgeschwindigkeit. Das elektrische Potential wird durch φ und das magnetische Vektorpotential durch \mathbf{A} festgelegt. Die Lagrangefunktion enthält daher mit $-e\varphi + e\mathbf{A}\mathbf{v}$ ein geschwindigkeitsabhängiges Potential. Die Bewegungsgleichungen ergeben sich nach dem Prinzip der Variationsrechnung zu

$$\frac{d}{dt} \nabla_{\mathbf{v}} L - \nabla_{\mathbf{r}} L = 0. \quad (3.3)$$

Da in unserem Fall keine zeitabhängigen Felder berücksichtigt werden, ist das System konservativ und die Hamiltonfunktion eine Konstante der Bewegung $H = E$. Da sich mittels einer Legendretransformation die Hamiltonfunktion zu $H = \mathbf{p}\mathbf{v} - L$ ergibt, läßt sich die Beziehung $L = \mathbf{p}\mathbf{v} - E$ ausnutzen, um die Wirkungsfunktion (3.1) auf ein Wegintegral S

$$W(\mathbf{r}, t) = S(\mathbf{r}) - Et, \quad S(\mathbf{r}) = \text{Extr.} \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{p} d\mathbf{r} \quad (3.4)$$

zu reduzieren (Prinzip von Maupertius). Bildet man den Gradienten

$$\nabla W = \nabla S = \mathbf{p}, \quad (3.5)$$

ist zu erkennen, daß der kanonische Impuls $\mathbf{p} = m\mathbf{v} - e\mathbf{A}$ senkrecht auf den Flächen $S = \text{const.}$ stehen muß (**Abb. 3.1**).

Dieses Prinzip ist zum Fermatschen Prinzip in der Lichtoptik analog [[de Broglie 1927](#)], wonach der optische Weg

$$\tilde{S}(\mathbf{r}) = \text{Extr.} \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} n ds = \text{Extr.} \frac{1}{k_0} \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{k} ds \quad (3.6)$$

ein Extremum sein muß. Dabei ist n der Brechungsindex des Mediums und k die Wellenzahl der Lichtwelle. In der Tat ergeben sich analoge Gleichungen für den Gradienten, wenn mittels der Eikonalnäherung die skalare Wellengleichung der Maxwelltheorie mit dem Ansatz

$$u(\mathbf{r}, t) = e^{A(\mathbf{r}) + ik_0(\tilde{S}(\mathbf{r}) - ct)} . \quad (3.7)$$

gelöst wird [Rose 1987b, Goldstein]. Auch hier stehen die Flächen mit konstantem \tilde{S} , die in diesem Fall Wellenfronten beschreiben, senkrecht zu den Trajektorien. In Abb. 3.1 sind dabei \tilde{S} mit S und \mathbf{k} mit \mathbf{p} zu vergleichen. Dies ergibt sich aus der Eikonalgleichung der geometrischen Optik des Lichts:

$$(\nabla \tilde{S})^2 = n^2 , \quad \nabla \tilde{S} = \mathbf{n} := \frac{\mathbf{k}}{k_0} . \quad (3.8)$$

Notwendige Bedingung bei dieser Argumentation ist wiederum, daß sich der Brechungsindex n über den Bereich einer Wellenlänge nur wenig ändert.

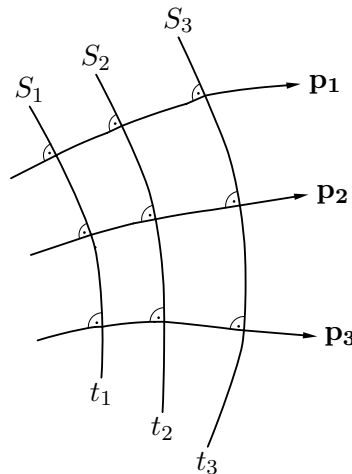


Abbildung 3.1: Der kanonische Impuls \mathbf{p} steht senkrecht auf den Flächen konstanter Phase $S(\mathbf{r}) - Et$.

Eine weitere Verwandtschaft ist zu erkennen, löst man die Schrödingergleichung der Quantenmechanik mit der sogenannten WKB-Näherung [Sakurai]. Die Betrachtungen beziehen sich hierbei auf den ortsabhängigen Anteil S der Phase der Wellenfunktion

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_0(\mathbf{r}) e^{\frac{i}{\hbar}(S(\mathbf{r}) - Et)} . \quad (3.9)$$

Auch hier gilt wieder, daß der kanonische Impuls $\mathbf{p} = m\mathbf{v} - e\mathbf{A}$ nach Gleichung (3.5) senkrecht auf den Flächen konstanter Phase S stehen muß (Abb. 3.1). Wird vorausgesetzt, daß die Felder sich über den Bereich einer Wellenlänge nicht ändern, führt dies im nichtrelativistischen Fall zu einer Bestimmungsgleichung für S , die der Hamilton Jacobi Gleichung der

klassischen Mechanik entspricht [Sakurai]. Die Prinzipien von Fermat und Maupertius haben somit durch die Beziehungen von Einstein $E = \hbar\omega$ (Frequenz $\omega = k_0c$ für Licht) und de Broglie $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ einen Zusammenhang [Rose 1987b]. Auf diese Weise lassen sich Quantenmechanik und Lichtoptik vergleichen, einzig abhängig von der Planckschen Naturkonstanten \hbar .

Durch die oben geschilderte Analogie des Prinzips von Maupertius und Fermat läßt sich auch in der Teilchenoptik ein Brechungsindex einführen. Durch Vergleich der Gleichungen (3.4) und (3.6), läßt sich die Größe

$$n := \frac{\mathbf{k}\hat{\mathbf{v}}}{k_0} := \frac{mv - e\mathbf{A}\hat{\mathbf{v}}}{m_0c} \quad (3.10)$$

als ein teilchenoptischer Brechungsindex identifizieren. Dabei bedeutet der Vektor $\hat{\mathbf{v}}$ den Einheitsvektor in Richtung des Geschwindigkeitsvektors \mathbf{v} und $k_0 = m_0c/\hbar$ die Comptonwellenzahl. Einige Besonderheiten sind bei dieser Begriffsbildung zu beachten. Zunächst ist die Geschwindigkeit v abhängig vom elektrischen Potential, daß durch eine beliebige additive Konstante geeicht werden kann. Zusätzlich ist das magnetische Vektorpotential nur eindeutig bestimmt bis auf einen additiven Gradienten eines beliebigen Skalarpotentials. Der teilchenoptische Brechungsindex ist demnach nicht eichinvariant. Zur Eichung des elektrischen Potentials wird vereinbart, daß für $v = 0$ auch $\varphi = 0$ gilt. An der Kathodenspitze sind die Elektronen also in Ruhe. Die Eichung des magnetischen Vektorpotentials \mathbf{A} wird später diskutiert. Naheliegender wäre die übliche Coulomb-Eichung. Für eine Lösung der Euler-Lagrange Gleichungen der Variationsrechnung (3.4) spielen diese Eichfreiheiten allerdings keine Rolle. Bemerkenswert ist weiterhin, daß der Brechungsindex nicht isotrop ist, d. h. die Trajektorie des Teilchens steht nicht mehr senkrecht auf den Flächen $S = \text{const.}$, wenn ein Magnetfeld vorhanden ist. Verantwortlich dafür ist der Term $-e\mathbf{A}\hat{\mathbf{v}}$, wobei $\hat{\mathbf{v}}$ die Richtung der Trajektorie bestimmt.

Zur Lösung der Bewegungsgleichungen ziehen wir Gleichung (3.4) heran. Damit sind sowohl die Teilcheneigenschaft wie auch der Wellencharakter durch die Funktion S , wie oben dargestellt, festgelegt. Weiterhin ist an die Stelle eines Zeitintegrals der Wirkungsfunktion (3.1) ein Wegintegral als Variationsproblem getreten, so daß es sinnvoll erscheint anstelle der Zeit, die Bogenlänge einer zentralen Trajektorie als Bahnparameter zu benutzen. In dem hier dargestellten Fall, in Abwesenheit von resultierenden lateralen Feldern, fällt diese optische Achse mit der z -Achse des kartesischen Koordinatensystems zusammen. Verwendet man die übliche komplexe Schreibweise $w = x + iy$, $\bar{w} = x - iy$ und $A = A_x + iA_y$, $\bar{A} = A_x - iA_y$, ergibt sich für die Variation des Eikonalen

$$\delta \left(\frac{S}{m_0c} \right) = \delta \int_{z_0}^z n \frac{ds}{dz} dz := \delta \int_{z_0}^z \mu dz = 0, \quad (3.11)$$

wobei die Funktion $\mu := \mu(w, \bar{w}, w', \bar{w}', z)$ nach Gleichung (3.10) durch

$$\mu = \sqrt{\frac{2e}{m_0c^2} \varphi^* (1 + w'\bar{w}')} - \frac{e}{m_0c} (A_z + \Re(\bar{A}w')) \quad (3.12)$$

definiert ist. Die Striche bedeuten Ableitungen nach z und \Re bezeichnet den Realteil der betrachteten komplexen Größe. Die Größe φ^* ist als *relativistisch modifiziertes* elektrisches Potential zu verstehen [Glaser]. Diese ist definiert durch

$$\varphi^* := \varphi^*(w, \bar{w}, z) := \varphi(w, \bar{w}, z) (1 + \varepsilon \varphi(w, \bar{w}, z)) , \quad \varepsilon = \frac{e}{2m_0 c^2} . \quad (3.13)$$

Die Lösung dieses Variationsproblems

$$\frac{d}{dz} \frac{\partial \mu}{\partial w'} - \frac{\partial \mu}{\partial \bar{w}} = 0 \quad (3.14)$$

erhält man aus den Euler–Lagrange Gleichungen. Diese Gleichungen führen gewöhnlich auf nichtlineare Differentialgleichungen. Für optische Elemente weichen die Trajektorien meist nicht sehr weit von der Achse ab. Daher liegt nahe, die Funktion (3.12) in der Eikonalgleichung (3.11) nach den Größen w , \bar{w} , w' und \bar{w}' zu entwickeln und das Problem dann störungstheoretisch zu lösen. Das Ergebnis dieser Rechnungen ist eine Entwicklung der Bahnen nach den Steigungen und den Objektkoordinaten.

3.2 Potentialentwicklung entlang einer geraden Achse

Um eine Entwicklung nach den zuvor genannten Prinzipien durchführen zu können, ist eine angepaßte Darstellung der elektromagnetischen Felder notwendig, schließlich ist die Funktion μ vom elektrischen Skalarpotential und dem magnetischen Vektorpotential abhängig. Zunächst soll das elektrische Skalarpotential in den Koordinaten w , \bar{w} und z dargestellt werden. Ein geeigneter Ansatz [Rose 1966/1967] für eine Potenzreihendarstellung in diesen Größen ist

$$\varphi = \sum_{\iota=0}^{\infty} (w\bar{w})^{\iota} F_{\iota}(z, \vartheta) . \quad (3.15)$$

Die Funktion F_{ι} dieses Potenzreihenansatzes müssen durch die Laplacegleichung bestimmt werden. In komplexer Notation lautet diese

$$\Delta \varphi = 4\Re \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial w \partial \bar{w}} \right) + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial^2 z} = 0 . \quad (3.16)$$

Man erkennt leicht, daß für ebene Felder, d. h. Felder ohne z -Abhängigkeit, die harmonischen Polynome $\varphi_{\nu} = \Re(\Phi_{\nu} \bar{w}^{\nu})$ Lösung dieser Gleichung sind. Die komplexen Koeffizienten $\Phi_{\nu} = \Phi_{\nu,c} + i\Phi_{\nu,s}$ sind die ebenen elektrischen Multipolkoeffizienten mit der Zähligkeit ν . Um eine dreidimensionale Lösung der Laplacegleichung zu erhalten, muß der Potenzreihenansatz (3.15) in die Laplacegleichung (3.16) eingesetzt werden. Ein Koeffizientenvergleich ergibt für eine Entwicklung nach ebenen Multipolen

$$\varphi = \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\lambda=0}^{\infty} (-1)^{\lambda} \frac{\nu!}{\lambda!(\lambda+\nu)!} \left(\frac{w\bar{w}}{4} \right)^{\lambda} \Re(\Phi_{\nu}^{[2\lambda]}(z) \bar{w}^{\nu}) . \quad (3.17)$$

Die eckigen Klammern bedeuten hier die 2λ -fache Ableitung nach z . Damit ist die Abhängigkeit von φ nach den Achsabständen w und \bar{w} komplett beschrieben. Zur vollständigen Beschreibung des echten Potentials genügt es daher, die ebenen Multipolkoeffizienten Φ_ν als Funktion der Koordinate z zu kennen.

In Gleichung (3.12), die zur Lösung der Bewegungsgleichungen bekannt sein muß, tritt auch das magnetische Vektorpotential auf. Um dieses angeben zu können wird ausgenutzt, daß in der Nähe der optischen Achse keine Ströme existieren. Da in den meisten Fällen der Elektronenoptik nur kleine Strahlströme benutzt werden, kann man Wechselwirkungen innerhalb des Elektronenstrahles selbst vernachlässigen. Demnach kann ein magnetisches Skalarpotential verwendet werden. Da auch dieses die Laplacegleichung erfüllen muß, gilt die gleiche Reihenentwicklung wie für das elektrische Skalarpotential. Nach den Ersetzungen $\varphi \rightarrow \psi$ und $\Phi \rightarrow \Psi$ folgt die Darstellung

$$\psi = \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\lambda=0}^{\infty} (-1)^\lambda \frac{\nu!}{\lambda!(\lambda+\nu)!} \left(\frac{w\bar{w}}{4} \right)^\lambda \Re(\Psi_\nu^{[2\lambda]}(z) \bar{w}^\nu) \quad (3.18)$$

für das magnetische Skalarpotential. Dabei bezeichnet $\Psi_\nu = \Psi_\nu(z) = \Psi_{\nu,c}(z) + i\Psi_{\nu,s}(z)$ die axiale magnetische Multipolstärke ν 'ter Zähligkeit. Um zu einer Entwicklung des Vektorpotentials zu gelangen, nutzt man die Definitionsgleichungen

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = -\nabla\psi \quad (3.19)$$

der Potentiale aus. In der komplexen Schreibweise ergeben sich hieraus die partiellen Differentialgleichungen

$$2i \frac{\partial\psi}{\partial w} = -\frac{\partial\bar{A}}{\partial z} + 2 \frac{\partial A_z}{\partial w} \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial z} = 2\Im\left(\frac{\partial\bar{A}}{\partial\bar{w}}\right) \quad (3.21)$$

für die Komponenten des magnetischen Vektorpotentials. Diese Gleichungen erhält man nach einer kurzen Rechnung unter Verwendung der Beziehung $\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y} = 2\frac{\partial}{\partial\bar{w}}$.

Das Vektorpotential ist nicht eichinvariant. Wie an Gleichung (3.19) zu erkennen, ändert sich die magnetische Induktion \mathbf{B} und damit die Bewegungsgleichungen (3.14) nicht, wenn auf das Vektorpotential der Gradient eines Skalarpotentials aufaddiert wird. Eine in der Elektronenoptik häufig verwendete Eichung [Plies, Typke 1978] ist $A_z = 0$. In [Rose 1987b] wird vorgeschlagen ein komplexes Potential

$$\Pi = \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\lambda=0}^{\infty} (-1)^\lambda \frac{\nu!}{\lambda!(\lambda+\nu)!} \left(\frac{w\bar{w}}{4} \right)^\lambda \Psi_\nu^{[2\lambda]}(z) \bar{w}^\nu \quad (3.22)$$

zu verwenden, dessen Real- und Imaginärteil die Laplacegleichung (3.16) löst. Das Vektorpotential \mathbf{A} wird nun durch die Forderung $A_z = \Im(\Pi)$ geeicht und das magnetische Skalarpotential ist durch $\psi = \Re(\Pi)$ gegeben. Die lateralen Komponenten des Vektorpotentials

lassen sich aus Gleichung (3.21) bestimmen

$$\bar{A} = \frac{i}{2} \int \frac{\partial \Pi}{\partial z} \partial \bar{w} \quad (3.23)$$

und Gleichung (3.20) ist automatisch erfüllt. Die hier verwendete Eichung entspricht der Coulomb-Eichung

$$\nabla \mathbf{A} = 2\Re \left(\frac{\partial \bar{A}}{\partial \bar{w}} \right) + \frac{\partial A_z}{\partial z} = 0 \quad (3.24)$$

und liefert die Darstellungen

$$A_z = \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\lambda=0}^{\infty} (-1)^\lambda \frac{\nu!}{\lambda!(\lambda+\nu)!} \left(\frac{w\bar{w}}{4} \right)^\lambda \Im (\Psi_\nu^{[2\lambda]}(z) \bar{w}^\nu) \quad (3.25)$$

und

$$\bar{A} = \frac{i}{2} \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\lambda=0}^{\infty} (-1)^\lambda \frac{\nu!}{\lambda!(\lambda+\nu+1)!} \left(\frac{w\bar{w}}{4} \right)^\lambda \Psi_\nu^{[2\lambda+1]}(z) \bar{w}^{\nu+1}. \quad (3.26)$$

Zusammenfassend ist damit eine Entwicklung des elektrischen Potentials und des magnetischen Vektorpotentials nach w und \bar{w} gefunden. Bestimmt werden müssen noch die ebenen Multipolkoeffizienten $\Phi_\nu(z)$ und $\Psi_\nu(z)$, die als reine axiale Multipolstärken als Funktion von z erklärt sind. Auf dieses Problem wird später eingegangen.

3.3 Beschreiben des Bewegungsproblems mit Hilfe des Eikonales

In den vorangehenden Abschnitten wurden die Hilfsmittel, um die Funktion μ aus Gleichung (3.11) zu berechnen bereitgestellt. In diesem Abschnitt sollen diese Kenntnisse zur Lösung des Bewegungsproblems genutzt werden.

Die einfachste denkbare Methode ist, die Bewegungsgleichungen (3.14) direkt zu lösen. Dieses Vorgehen führt allerdings auf nichtlineare Differentialgleichungen, die allgemein nur numerisch gelöst werden können. Um sich aber einen Überblick über die Abbildungseigenschaften eines gewünschten Systems verschaffen zu können ist es angebracht, so lange wie möglich analytisch zu rechnen und auf diese Weise Näherungslösungen zu finden. Dazu wird wie schon geschildert in Analogie zur Lichtoptik die Seidelsche Methode der Entwicklung nach der orthogonalen Entfernung zur optischen Achse angewendet.

In der ersten Ordnung können mit dieser Methode die Eigenschaften einer *idealen* Abbildung festgelegt und untersucht werden. Begriffsbildungen wie Punkt-zu-Punkt Abbildung, Vergrößerung und Bildebene werden so definiert.

Im nächsten Schritt wird der nichtlineare Teil der Abbildung untersucht. Dieser beschreibt die störenden Anteile, die Bildfehler. Aufgrund der Entwicklung lassen sich für elektromagnetische Felder die in Abschnitt 3.2 erwähnten axialen Multipole der Zähligkeit ν einer

bestimmten Ordnung der Fehlerkoeffizienten zuordnen, so daß sich klar der Einfluß eines solchen Multipoles auf eine bestimmte Entwicklungsordnung festlegen läßt. Dies spielt bei der Korrektur von Bildfehlern eine große Rolle. Außerdem kann die Geometrie von Polschuhen und Elektroden auf diese Weise für die bestmögliche Abbildung festgelegt werden.

3.3.1 Störungsentwicklung des Eikonales

Ausgangspunkt der weiteren Überlegungen sind die Euler–Lagrange Gleichungen (3.14) und die Variationsfunktion (3.12). Die komplexen Achsabstände w und \bar{w} sind bei der Variation als unabhängige Variable zu behandeln. Da die Euler–Lagrange Gleichung komplex ist, muß auch die konjugiert komplexe Gleichung betrachtet werden. Zur Berechnung der Teilchenbahnen genügt es allerdings, eine der beiden Gleichungen zu lösen. Im allgemeinen führt dies zu einer nichtlinearen Differentialgleichung. Unter der Voraussetzung, daß der Bündelquerschnitt der Teilchen, d. h. der Achsabstand gegenüber den Bohrungsdurchmessern der Polschuhe und Elektroden und die Steigung der Teilchenbahn relativ zur optischen Achse klein bleibt, wie dies bei den meisten optischen Elementen erfüllt ist, läßt sich die entstandene Differentialgleichung linearisieren. Die nichtlinearen Beiträge der Differentialgleichung sind unter diesen Bedingungen klein und können als Störung der linearen Bewegungsgleichung behandelt werden.

Weiterhin soll noch die Abweichung der Teilchenenergie von der Sollenergie beachtet werden. Dazu wird in der Variationsfunktion μ die Substitution

$$\varphi(w, \bar{w}, z) \longrightarrow \varphi(w, \bar{w}, z) + \kappa U, \quad \kappa := \frac{\Delta E}{E_p} = \frac{\Delta U}{U} \quad (3.27)$$

durchgeführt. Im folgenden bezeichnet dies die Farbabweichung der Teilchen. Dabei geben E_p bzw. U die Sollenergie bzw. das Sollpotential des Teilchens auf der Achse an. Das Δ beschreibt die absolute Abweichung der jeweiligen Größe und κ somit die relative Abweichung. Die Größe φ gibt den Verlauf des elektrischen Potentials an.

Zum Ausführen der Entwicklung substituiert man nun die Farbabweichung (3.27) und setzt das elektrische Potential (3.17) und die Komponenten des magnetischen Vektorpotentials (3.25) und (3.26) in die Variationsfunktion (3.12) ein. Die Taylorentwicklung wird nach den als unabhängig zu behandelnden Variablen w, \bar{w}, w', \bar{w}' und κ durchgeföhrt. Das Ergebnis ist die Reihe

$$\mu = \sum_{k=0}^{\infty} \mu^{(k)} = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{k-1} \mu^{(k-n,n)} \quad (3.28)$$

für die Funktion μ . Dabei bedeutet der Index k die Summe der Entwicklungsexponenten und der Index n der Grad der relativen Farbabweichung κ . Diese Schreibweise folgt der in [Plies, Typke 1978] eingeföhrt. Dabei wird außer der Farbabweichung κ auf eine weitere Berücksichtigung von Störpotentialen beliebiger Zähligkeit verzichtet. Eine solche findet sich zum Beispiel in [Uhlemann 1995].

Die Polynome der Entwicklung für die Variationsfunktion μ bis einschließlich zweiten Ranges lauten:

$$\mu^{(1)} = \sqrt{\varepsilon} \frac{\Lambda}{\sqrt{\Phi^*}} \Re((\Phi_1 + i v_0 \Psi_1) \bar{w}) \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \mu^{(2)} = & \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{\Phi^*}} \left(-\frac{\Lambda}{8} \left(2\Phi_0'' + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{\Lambda \Phi^*} \right) w \bar{w} + \Phi^* \bar{w}' w' - \frac{1}{4} \frac{\kappa^2 U^2}{\Phi^*} \right. \\ & + \Re \left(\frac{1}{2} i \Lambda v_0 \Psi_0' w \bar{w}' - \frac{1}{2} \frac{\kappa U \Phi_1}{\Phi^*} \bar{w} \right. \\ & \left. \left. + \Lambda \left(\Phi_2 + i v_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8 \Lambda \Phi^*} \right) \bar{w}^2 \right) \right). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Dabei wurden auch die Entwicklungsanteile $\mu^{(k-n,n)}$ nach der Farbabhängigkeit κ berücksichtigt. Die Funktion $\mu^{(0)}$ spielt für diese Überlegungen keine Rolle, da sie nur eine Funktion von z ist und nicht von den außeraxialen Koordinaten w, \bar{w}, w' und \bar{w}' abhängt. Das axiale relativistisch modifizierte elektrische Potential Φ^* leitet sich aus der Beziehung

$$\Phi^*(z) = \varphi^*(0, 0, z) = \Phi_0(z)(1 + \varepsilon \Phi_0(z)) \quad (3.31)$$

ab. Die Abkürzungen für die Größe Λ und die relativistisch modifizierte axiale Geschwindigkeit v_0 sind durch

$$\Lambda(z) = 1 + 2\varepsilon \Phi_0(z) \quad (3.32)$$

$$v_0(z) = v(0, 0, z) = 2c \frac{\sqrt{\varepsilon \Phi^*(z)}}{\Lambda(z)}. \quad (3.33)$$

gegeben. Die Gleichung für die Geschwindigkeit v_0 ergibt sich wiederum aus dem relativistischen Energiesatz $(m - m_0)c^2 = e\varphi$. Die Entwicklungspolynome bis vierten Ranges finden sich in [Plies, Typke 1978].

3.3.2 Die Fundamentalbahnen

In den vorangegangenen Abschnitten wurde dargelegt, daß eine Entwicklung nach Potenzen des Achsabstandes sinnvoll ist. Die erste Ordnung dieser Bahnentwicklung wird im folgenden als das System der Fundamentalbahnen bezeichnet. Um dieses berechnen zu können, betrachtet man die Entwicklung der Variationsfunktion bis zweiter Ordnung. Die Bewegungsgleichungen ergeben sich durch die Euler Lagrange Gleichungen (3.14), so daß sich mit Hilfe der Gleichung (3.28) die paraxiale Bahngleichung durch

$$\left(\frac{d}{dz} \frac{\partial}{\partial \bar{w}'} - \frac{\partial}{\partial \bar{w}} \right) (\mu^{(0)} + \mu^{(1)} + \mu^{(2)}) = 0 \quad (3.34)$$

berechnen läßt. Nach dem Ausführen der Differentiation führt dies auf die lineare inhomogene Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$\begin{aligned}
 w'' &+ \frac{\Lambda (\Phi_0' + i v_0 \Psi_0')}{2\Phi^*} w' \\
 &+ \frac{\Lambda}{4\Phi^*} \left(\Phi_0'' + i v_0 \Psi_0'' + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{2\Lambda \Phi^*} \right) w \\
 &- \frac{\Lambda}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i v_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\Lambda \Phi^*} \right) \bar{w} \\
 = &\frac{\Lambda}{2\Phi^*} (\Phi_1 + i v_0 \Psi_1) - \frac{U \Phi_1}{4\Phi^{*2}} \kappa .
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

Zunächst spielen in dieser Differentialgleichung nur die ebenen Multipolkoeffizienten von der Zähligkeit $\nu = 0, 1, 2$ eine Rolle. Für die später zu diskutierenden Abbildungseigenschaften der Fundamentalbahnen werden demnach nur Rundlinsfelder Φ_0, Ψ_0 , Dipolfelder Φ_1, Ψ_1 und Quadrupolfelder Φ_2, Ψ_2 zu beachten sein.

Weiterhin ist zu erkennen, daß die z-Achse als optische Achse eine Teilchenbahn ist, wenn der Term

$$\frac{\Lambda}{2\Phi^*} (\Phi_1 + i v_0 \Psi_1) = 0 \tag{3.36}$$

des inhomogenen Anteils aus der letzten Zeile der paraxialen Bahngleichung (3.35) verschwindet. Laterale Beiträge zur Kraftwirkung der elektrischen und magnetischen Felder senkrecht zur Achse treten demnach nicht auf. In Transmissionselektronenmikroskopen findet man meist eine gerade Achse, d. h. es werden nur Rundlinsen und Quadrupole zur Fokussierung verwendet. Die einzige Anordnung, in der Dipolfelder für eine gerade Achse verwendet werden können, ist das Wien-Filter. In diesem Fall muß Beziehung (3.36) identisch gleich Null sein. Dies bedeutet, daß sich die Kraft aufeinander senkrecht stehender elektrischer und magnetischer Felder für eine Teilchenenergie aufheben [Rose 1987a], so daß für diese Energie eine geradlinige Achse Teilchenbahn ist. In Vektorschreibweise muß gelten

$$e\mathbf{v} \times \mathbf{B} = e\mathbf{E} . \tag{3.37}$$

Diese Bedingung wird sich nicht streng entlang der gesamten Ausdehnung der Dipolfelder erfüllen lassen. Die Grenzen dieser Festlegung lassen sich in Kapitel 3.4 aufzeigen. Die Differenz der elektrischen und magnetischen Dipolfelder können aber im Sinne von [Uhlemann 1995] als eine Störung von *schwach gekrümmten Achsen* aufgefaßt werden. Der Differenzeffekt der Dipolfelder läßt sich danach eine Ordnung höher *schieben* und ist wie in Abschnitt 3.3.3 zu behandeln. Ausdrücklich sei hier gesagt, daß dies nur für schwach gekrümmte optische Achsen gilt. Wenn der Differenzeffekt nicht mehr als kleine Störung aufzufassen ist, muß die schon vorher erwähnte Theorie gekrümmter Achsen als Teilchenbahn mit angepaßter Metrik angewandt werden.

Der zweite Term der letzten Zeile der Gleichung (3.35) ist von der relativen Farbabweichung κ abhängig. Er tritt im Fall einer geraden Achse nur für Wienfilter-artige Systeme auf. Ist die

homogene Differentialgleichung einmal gelöst, d. h. sind die Fundamentalbahnen gefunden, läßt sich der verbliebene Term der inhomogenen Differentialgleichung nach dem bekannten Verfahren der Variation der Konstanten, wie in Kapitel 3.3.3 geschildert, lösen. Das Ergebnis ist eine weitere paraxiale Bahn ersten Ranges, die *Dispersionsbahn* $w_\kappa(z)$, die eine neue optische Achse für Elektronen mit der relativen Energieabweichung κ beschreibt.

Zur Bestimmung des ersten Ranges der Entwicklung muß die paraxiale Differentialgleichung (3.35) gelöst werden. Der inhomogene Anteil dieser Gleichung wurde schon diskutiert. Betrachtet man die reellen Funktionen $x(z)$ und $y(z)$, ergeben sich für den homogenen Anteil zwei gekoppelte reelle Differentialgleichungen zweiter Ordnung. Demnach existieren vier linear unabhängige Lösungen [Rose, Petri 1971] der Differentialgleichung zweiter Ordnung für den Achsabstand $w(z)$ und $\bar{w}(z)$. Für den ersten Rang der Entwicklung $w^{(1)}$ sind alle Linearkombinationen in erster Näherung mögliche Elektronenbahnen. Inklusive der Lösung des inhomogenen Anteils der Differentialgleichung läßt sich demnach

$$w^{(1)}(z) = \sum_{\nu=1}^4 a_\nu w_\nu(z) + \kappa w_\kappa(z) \quad (3.38)$$

als Lösung der paraxialen Bahngleichung (3.35) schreiben. Die Bahnen $w_\nu(z)$ bezeichnet man als Fundamentalbahnen. Die konstanten reellen Faktoren a_ν lassen sich durch die Anfangsbedingungen der Elektronenbahn festlegen. Um ihnen eine physikalische anschauliche Bedeutung zu verleihen, ist es üblich sie in der Objektebene festzulegen. Dazu führt man *axiale* Bahnen mit den Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} w_\alpha &= 0 & w'_\alpha &= 1 \\ w_\beta &= 0 & w'_\beta &= i \end{aligned} \quad (3.39)$$

ein. Sie starten in der Mitte der Objektebene jeweils im xz - bzw. yz -Schnitt mit der Steigung Eins. In der Gleichung (3.38) sollen sie im folgenden den Indizes $\nu = 1, 2$ entsprechen. Die Vorfaktoren $a_1 := \alpha$ und $a_2 := \beta$ entsprechen unter diesen Bedingungen dem Öffnungswinkel der Elektronenbahn in der Objektebene. Desweiteren geben die übrigen beiden Fundamentalbahnen für $\nu = 3, 4$ die Objektkoordinaten im xz -Schnitt durch $a_3 := \gamma$ und yz -Schnitt durch $a_4 := \delta$ an. Die Größen γ und δ sind die auf die Länge l normierten Objektkoordinaten. Diese so definierten *Felddbahnen* haben demzufolge die Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} w_\gamma &= l & w'_\gamma &= \theta_0 \\ w_\delta &= il & w'_\delta &= i\theta_0 \end{aligned} \quad (3.40)$$

Die Länge l kann beispielsweise als Brennweite der Objektivlinse in einem Elektronenmikroskop gewählt sein. Die Größe θ_0 in der Objektebene beschreibt die Neigung der Bahn im jeweiligen Schnitt und wird für teleskopische Systeme (paralleler Einfall) zu $\theta_0 = 0$ gewählt. Oft wird auch der Fall $\theta_0 = -1$ benutzt, je nachdem wie durch das vorhergehende System diese Bahnen festgelegt werden. Demnach wird eine paraxiale Elektronenbahn, zu der nur lineare Terme der Bewegungsgleichung (3.14) beitragen, durch die Öffnungswinkel α, β , die

Objektkoordinaten γ, δ und die relative Farbabweichung κ in der Objektebene vollständig festgelegt.

Um die paraxiale Bahngleichung (3.35) in eine übersichtlichere Gestalt zu bringen, ist es üblich nach [Rose 1994b] die komplexe Transformation

$$U = \Phi^{*\frac{1}{4}} e^{-i\chi} w \quad (3.41)$$

für die Variable w zu verwenden. Nach einer kurzen Rechnung ergibt sich, daß mit dieser Transformation der Term mit w' oder jetzt U' in der paraxialen Bahngleichung (3.35) verschwindet. Für den Winkel χ ergibt sich dabei die Beziehung

$$\chi = -\frac{1}{4} \int_{z_0}^z \frac{\Lambda}{\Phi^*} v_0 \Psi'_0 dz . \quad (3.42)$$

Diese Gleichung bedeutet, daß die Koordinaten w um die halbe Lamorfrequenz gedreht werden [Rose 1994b], [Scherzer 1936a]. Die Teilchenbahnen sind bei Anwesenheit von magnetischen Rundlinsenfeldern verschraubt. Die senkrechte Komponente der Teilchengeschwindigkeit bezüglich des magnetischen Rundlinsenfeldes bewirkt in homogenen Feldern eine reine Kreisbewegung. Der homogene Anteil der Bahngleichung (3.35) erhält durch die Transformation (3.41) die Gestalt

$$U'' + TU - G\bar{U} = 0 , \quad (3.43)$$

mit

$$T = \bar{T} = \frac{1}{8} \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{\Phi^{*2}} + \frac{\Lambda^2 + 2}{16} \frac{\Phi_0'^2}{\Phi^{*2}} + \frac{1}{16} \frac{\Lambda^2}{\Phi^{*2}} v_0^2 \Psi_0^2 \quad (3.44)$$

und

$$G = \left(\frac{\Lambda}{\Phi^*} (\Phi_2 + i v_0 \Psi_2) - \frac{\Phi_1^2}{8 \Phi^{*2}} \right) e^{-2i\chi} . \quad (3.45)$$

Der Sinn dieser Betrachtung liegt darin, die Differentialgleichung im xz- und yz-Schnitt möglichst zu entkoppeln. Für gerade Achse ohne Dipolfelder wurde eine allgemeine Bedingung dafür in [Rose 1966/1967] angegeben. Für diese Arbeit reicht es aus bei Abwesenheit von Rundlinsenfeldern nur Felder mit Einschnittsymmetrie [Plies, Typke 1978] zu berücksichtigen. Dabei gilt dann mit der Schreibweise $\Phi_\nu = \Phi_{\nu,c} + i\Phi_{\nu,s}$ und $\Psi_\nu = \Psi_{\nu,c} + i\Psi_{\nu,s}$

$$\Re(\Psi_\nu) = \Psi_{\nu,c} \equiv 0 \quad \Im(\Phi_\nu) = \Phi_{\nu,s} \equiv 0 . \quad (3.46)$$

Bei der alleinigen Anwesenheit von Rundlinsen [Scherzer 1936a] (Felder der Zähligkeit $\nu = 0$) ist die Differentialgleichung (3.43) schon entkoppelt. Ohne weitere Ausführung stellt man fest [Uhlemann 1995], daß diese Entkoppelung auch für Systeme mit Rundlinsen und Quadrupolen gilt, solange für die Quadrupole die Gleichung (3.46) erfüllt ist. Durch die Entkoppelung der Differentialgleichungen bleiben die paraxialen Bahnen immer in einem

Schnitt des lamorgedrehten Systems. Dann ist es sinnvoll mit rein reellen Fundamentalbahnen zu rechnen, die sich aus den vorher definierten nach

$$w_\alpha(z) = x_\alpha(z) , \quad w_\beta(z) = iy_\beta(z) , \quad w_\gamma(z) = x_\gamma(z) , \quad w_\delta(z) = iy_\delta(z) \quad (3.47)$$

ergeben.

Mit Hilfe der Gleichung (3.43) läßt sich auf übliche Weise die Wronski Determinante der Differentialgleichung festlegen. Es ergeben sich die Helmholtz–Lagrange Gleichungen für die Koordinaten U

$$\Re(U_\nu \bar{U}'_\mu - \bar{U}_\mu U'_\nu) = C_{\mu\nu} = -C_{\nu\mu} \quad (3.48)$$

oder in den Koordinaten w

$$\sqrt{\Phi^*} \Re(\bar{w}_\nu w'_\mu - \bar{w}_\mu w'_\nu - 2i\chi' w_\mu \bar{w}_\nu) = C_{\mu\nu} . \quad (3.49)$$

Im folgenden werden magnetische Rundlinsfelder nicht berücksichtigt, so daß keine Lamordrehung vorhanden ist und $\chi' \equiv 0$ gilt. Außerdem werden alle weiteren Rechnungen im System der Koordinaten w ausgeführt. Mit den Anfangsbedingungen (3.39, 3.40) lassen sich die Beziehungen

$$\begin{aligned} C_{\alpha\gamma} &= l\sqrt{\Phi^*} = -C_{\gamma\alpha} \\ C_{\beta\delta} &= l\sqrt{\Phi^*} = -C_{\delta\beta} \\ C_{\alpha\beta} &= C_{\alpha\delta} = C_{\beta\gamma} = C_{\gamma\delta} = 0 \end{aligned} \quad (3.50)$$

herleiten. Die Helmholtz–Konstanten sind nur abhängig von der Normierungslänge l und nicht von der Startneigung θ_0 der Fundamentalbahnen. Bei der Berechnung der Bildfehler werden die Helmholtz–Lagrange (3.50) Sätze nützlich sein.

Bisher wurde beschrieben, daß eine Elektronenbahn durch die Ortskoordinaten und die Öffnungswinkel in der Objektebene eindeutig festgelegt wird. Die paraxiale Näherung ist gegeben durch die Linearkombination (3.38) der Lösungen einer homogenen Differentialgleichung (3.35) zweiter Ordnung. Die Abbildung eines beliebigen Objektes möchte man alleine durch die Ortskoordinaten festlegen. Die relative Größenänderung dieser Koordinaten von einer Ebene zur anderen legt den Vergrößerungsmaßstab fest. Um eine Unabhängigkeit vom Öffnungswinkel in einer Ebene zu gewährleisten, muß jene Fundamentalbahn, die diesen Parameter mit sich führt, in dieser Ebene verschwinden. Jede Nullstelle einer axialen Bahn legt nach dieser Darlegung eine Strichabbildung des jeweiligen Schnittes in der Ebene der Nullstelle fest. Für eine vollständige zweidimensionale Abbildung einer Ebene, z.b. der Objektebene, sollten die Nullstellen der axialen Fundamentalbahnen im xz - und yz -Schnitt in einer Ebene, der Bildebene, zusammenfallen. Nach den bisherigen Ausführungen ist dies genau dann der Fall, wenn

$$w_\alpha(z_I) = w_\beta(z_I) = 0 \quad (3.51)$$

gilt. Die Ebene z_I legt die Bildebene (I für image plane) fest. Alle Bahnen, die dann von einem Punkt in der Objektebene ausgehen, werden in paraxialer Näherung in einem Punkt

der Bildebene zusammen geführt. Da bei der Linearkombination der Lösungen der Differentialgleichung (3.35) in diesem Fall ausschließlich die Feldbahnen übrig bleiben, geben diese die absolute Ausdehnung des abgebildeten Objektes an. Dividiert man diese durch die ursprüngliche in der Objektebene, erhält man die Vergrößerung.

Das umgekehrte Vorgehen einer Abbildung der Beugungsebene ist auch denkbar. Jede Nullstelle der Feldbahnen gibt eine Beugungsebene im jeweiligen Schnitt an, in der alle Bahnen, die mit identischem Öffnungswinkel in der Objektebene starten, zusammenfallen. Daher gilt für eine stigmatische Beugungsebene z_D (D für diffraction plane)

$$w_\gamma(z_D) = w_\delta(z_D) = 0 \quad , \quad (3.52)$$

wiederum für eine zweidimensionale Abbildung. Durch die Helmholtz–Lagrange Sätze läßt sich beweisen, daß Bildebenen und Beugungsebenen nur abwechselnd aufeinander folgen dürfen. Dies ist als Bildwechselsatz der Elektronenoptik bekannt [Rose 1994b].

Weiterhin ist eine andere Wahl von Fundamentalbahnen möglich, die sich aus den alten Fundamentalbahnen durch Linearkombination berechnen lassen. Dazu ist ein lineares Gleichungssystem zu lösen. Diese neuen Fundamentalbahnen haben neue Nullstellen und definieren somit andere Bild- und Beugungsebenen.

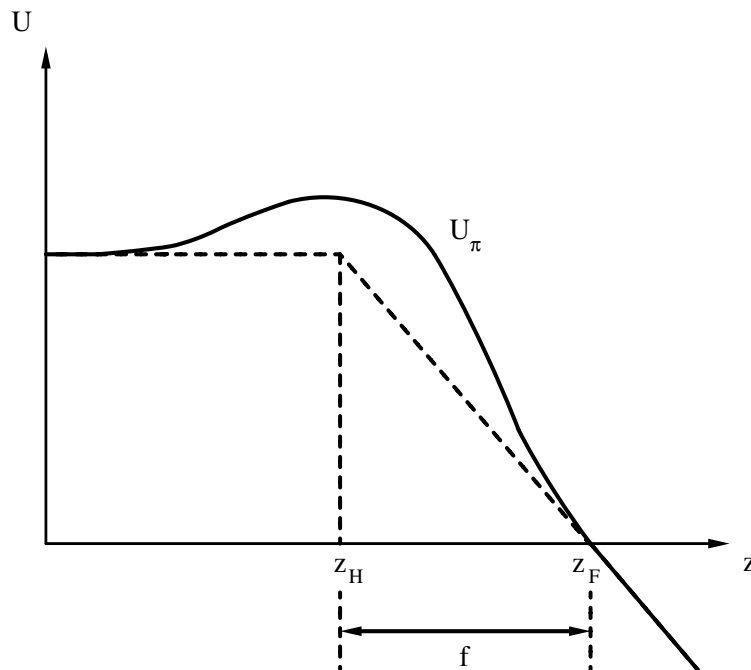


Abbildung 3.2: Die Konstruktion der bildseitigen Kardinalpunkte.

Auf diese Weise lassen sich z.B. für alle Systeme Bahnen bestimmen, die in ihrem jeweiligen Schnitt entweder teleskopisch in das System einfallen oder ausfallen. Die teleskopisch einfallende Bahn heie U_π und die ausfallende $U_{\bar{\pi}}$. Betrachtet man den asymptotischen Verlauf

dieser Bahnen lassen sich Hauptebenen z_H und $z_{\bar{H}}$, Brennebenen z_F und $z_{\bar{F}}$ und Brennweiten nach

$$f = z_F - z_H, \quad \bar{f} = z_{\bar{H}} - z_{\bar{F}}, \quad (3.53)$$

wie in der Lichtoptik einführen. Die Konstruktion läßt sich in **Abb. 3.2** für teleskopischen Einfall ablesen. Für die parallel ausfallende Bahn verläuft sie analog. Mit diesen bild- und objektseitigen Kardinalenlementen lassen sich Bildebene und Vergrößerung einer Abbildung auf bekannte Art festlegen.

Die oben beschriebenen Begriffe der Abbildung einer Bild- oder Beugungsebene der Gleichungen (3.51, 3.52) definieren die *ideale* Abbildung aus Abschnitt 3.1, die demnach ausschließlich durch die Fundamentalbahnen beschrieben wird. Nur der Rang bis einschließlich zweiter Ordnung der Funktion μ in Gleichung (3.28) spielen dabei eine Rolle. Alle höheren Ränge werden als „Störungen“ betrachtet, die in Kapitel 3.3.3 untersucht werden.

3.3.3 Berechnung der Abbildungsfehler

In den vorangehenden Abschnitten dieses Kapitels wurde die paraxiale Optik in erster Ordnung beschrieben. Der Gültigkeitsbereich dieser Näherung ist nicht näher festgelegt worden, denn dazu ist die Berücksichtigung höherer Ordnungen notwendig. Um diese zu berechnen, ist die naheliegendste Vorgehensweise, die Funktion (3.12) bezüglich der Fundamentalbahnen $w^{(1)}$ aus Gleichung (3.38) zu betrachten. Alle höheren Ordnungen werden wie am Ende von Kapitel (3.1) beschrieben, als Abweichung von dieser idealen Abbildung aufgefaßt. Die Entwicklungsparameter sind demnach die Vorfaktoren a_ν und κ der paraxialen Lösung (3.38).

Die außeraxiale Koordinate w soll als eine Entwicklung der Form

$$w(z) = \sum_{r=1}^{\infty} \beta^r w^{(r)}(z) \quad (3.54)$$

in den Parametern a_ν und κ berechnet werden. Dabei gibt der Hilfsparameter β nur den Rang der Entwicklung an und wird am Ende der Berechnung zu $\beta = 1$ zur Bestimmung des jeweiligen Ranges gesetzt. Die Funktionen $w^{(r)}(z)$ sind Polynome in a_ν und κ mit Rang r . Für die weiteren Ausführungen ist die Einführung des Operators

$$D^{(r)} = 2\Re \left(w^{(r)} \frac{\partial}{\partial w^{(1)}} + w^{(r)'} \frac{\partial}{\partial w^{(1)'}} \right) \quad (3.55)$$

hilfreich. Dieser ersetzt in jedem Summanden $\mu_1^{(k)} = \mu^{(k)}(w^{(1)}, w^{(1)'}, z, \kappa)$ aus Gleichung (3.28) jeweils einmal die Funktionen $w^{(1)}, w^{(1)'}, \bar{w}^{(1)}, \bar{w}^{(1)'}$ durch die Abweichungen vom Rang r $w^{(r)}, w^{(r)'}, \bar{w}^{(r)}, \bar{w}^{(r)'}$. Mit Hilfe dieses Operators läßt sich nach [Rose 1987b] die Gleichung (3.28) nach den Parametern a_ν und κ entwickeln. Setzt man Gleichung (3.54) in die Variationsfunktion (3.28) ein, ergibt sich

$$\mu = \sum_{k=0}^{\infty} \mu^{(k)}(w, w', z, \kappa) = \sum_{r=1}^{\infty} \beta^{r+1} m^{(r+1)}, \quad (3.56)$$

wobei die Funktionen m Polynome in den Entwicklungsparametern a_ν und κ sind. Mit Hilfe des Operators $D^{(r)}$ lassen sich diese Polynome zu

$$m^{(r)} = \frac{1}{r!} \frac{\partial^r}{\partial \beta^r} \sum_{k=2}^r \beta^k \exp \left(\sum_{h=1}^{\infty} \beta^h D^{(h+1)} \right) \mu_1^{(k)} \Big|_{\beta=0} \quad (3.57)$$

berechnen [Rose 1987b]. Die Schreibweise \exp ist dabei abkürzend als Taylorreihe zu verstehen, so daß der Operator $D^{(h)}$ in der Exponentensumme von β immer Beiträge vom Rang $r+1$ auch für $h < r+1$ liefert. Damit ist die Variationsfunktion μ nach den Entwicklungsparametern a_ν und κ bekannt.

Die Differentialgleichung

Zur Berechnung der Abweichungen $w^{(r)}$ von den paraxialen Bahnen bieten sich im einfachsten Fall die Euler–Lagrange Gleichungen (3.14) an. Verwendet man dort die Darstellung nach den Polynomen $m^{(r)}$ in a_ν und κ , ergibt sich mit Hilfe von Gleichung (3.56)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \frac{\partial \mu}{\partial \bar{w}'} - \frac{\partial \mu}{\partial \bar{w}} &= \sum_{r=1}^{\infty} \beta^{r+1} \left(\frac{d}{dz} \frac{\partial m^{(r+1)}}{\partial \bar{w}'} - \frac{\partial m^{(r+1)}}{\partial \bar{w}} \right) \\ &= \sum_{r=1}^{\infty} \beta^{r+1} \left(\frac{d}{dz} \frac{\partial m^{(r+1)}}{\partial \bar{w}^{(1)'}} \frac{\partial \bar{w}^{(1)'}}{\partial \bar{w}'} - \frac{\partial m^{(r+1)}}{\partial \bar{w}^{(1)}} \frac{\partial \bar{w}^{(1)}}{\partial \bar{w}} \right) \\ &\stackrel{(3.54)}{=} \sum_{r=1}^{\infty} \beta^r \left(\frac{d}{dz} \frac{\partial m^{(r+1)}}{\partial \bar{w}^{(1)'}} - \frac{\partial m^{(r+1)}}{\partial \bar{w}^{(1)}} \right) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.58)$$

für die Funktionen $m^{(r)}$. Diese Gleichung soll für beliebige $\beta \in \mathbb{R}$ erfüllt sein und damit muß

$$\frac{d}{dz} \frac{\partial m^{(r+1)}}{\partial \bar{w}^{(1)'}} - \frac{\partial m^{(r+1)}}{\partial \bar{w}^{(1)}} = 0 \quad (3.59)$$

für jeden Rang r gelten. Nach der Methode der sukzessiven Approximation müßte in dieser Gleichung vom Rang r in den Parametern a_ν und κ eine Differentialgleichung zur Bestimmung der Abweichungen $w^{(r)}$ mit schon bekannten Funktionen $w^{(h)}$, $1 \leq h < r$ gelöst werden. Für $r = 1$ führt diese Gleichung unter Verwendung von Gleichung (3.57) auf die paraxiale Bahngleichung (3.35). Dieses Vorgehen ist allerdings für die meisten Anwendungen zu mühsam, da die $w^{(h)}$ noch von den a_ν und κ abhängen. Ein in der Physik gebräuchlicheres Verfahren ist die Umwandlung der Differentialgleichung (3.59) in eine Integralgleichung.

Die Abweichung $w^{(r)}$ für $r \geq 2$ soll berechnet werden. Der einzige Term in der Differentialgleichung (3.59), in dem $w^{(r)}$ auftreten kann, ist der Beitrag

$$D^{(r)} \mu_1^{(2)} \quad (3.60)$$

zu $m^{(r+1)}$. Dieser wird absepariert, so daß die Differentialgleichung

$$\left(\frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)}} - \frac{d}{dz} \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)'}} \right) D^{(r)} \mu_1^{(2)} = \left(\frac{d}{dz} \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)'}} - \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)}} \right) m_E^{(r+1)} \quad (3.61)$$

mit der verkürzten Variationsfunktion

$$m_E^{(r+1)} = m^{(r+1)} - D^{(r)} \mu_1^{(2)} \quad (3.62)$$

entsteht. Die linke Seite dieser Differentialgleichung ist die paraxiale Differentialgleichung (3.35), nur daß in dieser Notation dort jetzt nicht die Fundamentalbahnen $w^{(1)}$ zu bestimmen sind, sondern die Abweichungen $w^{(r)}$. Diesen Sachverhalt beschreibt die Beziehung [Hoffstätter 1991]

$$\sqrt{\varepsilon \Phi^*} L^{(1)} [w^{(r)}] = \left(\frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)}} - \frac{d}{dz} \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)'}} \right) D^{(r)} \mu_1^{(2)} \quad , \quad (3.63)$$

wobei $L^{(1)} [w]$ eine abkürzende Schreibweise für die paraxiale Bahngleichung (3.35) angibt. Da Gleichung (3.61) aber eine lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung ist, existieren nur die in Gleichung (3.38) angegeben linear unabhängigen Lösungen. Der homogene Teil der Differentialgleichung (3.61) ist demnach schon gelöst. Die rechte Seite der Gleichung (3.61) ist von den Funktionen $w^{(h)}$, $1 \leq h < r$ abhängig und nach der Methode der *sukzessiven Approximation* demzufolge nur eine Funktion von z . Die Lösung für diese rechte Seite ist als inhomogener Anteil der Differentialgleichung aufzufassen und läßt sich mit dem üblichen Verfahren der Variation der Konstanten ermitteln. Damit ist es möglich die Bahnabweichungen $w^{(r)}(z)$ zu berechnen, sofern zuvor jeder Rang von $w^{(h)}(z)$ mit $h < r$ bestimmt wurde.

Variation der Konstanten

Im folgenden sei die Inhomogenität mit $s^{(r)}(z)$ bezeichnet. Gleichung (3.61) schreibt sich kurz:

$$L^{(1)} [w^{(r)}] = \frac{s^{(r)}(z)}{\sqrt{\varepsilon \Phi^*}} \quad . \quad (3.64)$$

Durch den Ansatz (siehe z.B. [Uhlemann 1995]) mit den reellen Funktionen $G_\nu^{(r)}$

$$w^{(r)}(z) = \sum_{\nu=1}^4 (a_\nu + G_\nu^{(r)}(z)) w_\nu(z) \quad (3.65)$$

in Abwandlung zur homogenen Lösung (3.38) und den für dieses Verfahren üblichen Forderungen [Dallmann, Elster]

$$\sum_{\nu=1}^4 G_\nu^{(r)'} w_\nu' = \frac{s^{(r)}(z)}{\sqrt{\varepsilon \Phi^*}} \quad , \quad (3.66)$$

$$\sum_{\nu=1}^4 G_\nu^{(r)'} w_\nu = 0 \quad , \quad (3.67)$$

den Helmholtz–Lagrange Beziehungen (3.50) und den Anfangsbedingungen (3.39, 3.40) lässt sich die Determinantenbildung zur Lösung der Gleichungen (3.66, 3.67) nach den $G_\nu^{(r)}$ durchführen. Dazu multipliziert man die Gleichung (3.66) mit \bar{w}_μ und Gleichung (3.67) mit \bar{w}'_μ und subtrahiert sie voneinander. Der Realteil der entstehenden Gleichung ergibt sich zu

$$\sum_{\nu=1}^4 G_\nu^{(r)'} C_{\nu\mu} = \Re \left(\frac{s^{(r)} \bar{w}_\mu}{\sqrt{\varepsilon}} \right) \quad . \quad (3.68)$$

Die speziellen Bedingungen für die Helmholtz Konstanten $C_{\nu\mu}$ in den Gleichungen (3.50) führen zu den einfachen Beziehungen

$$C_{\nu\mu} G_\nu^{(r)} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \int_{z_0}^z \Re (\bar{w}_\mu s^{(r)}) dz \quad . \quad (3.69)$$

Zur Bestimmung der reellen Funktionen $G_\nu^{(r)}(z)$ in Abwesenheit von elektrischen Rundlin-senfeldern ($\Phi_0 = \text{const.}$) lässt sich diese Gleichung (3.69) heranziehen.

Die Integralgleichung

Die Bahnabweichungen $w^{(r)}$ lassen sich dann mit dem Ansatz (3.65) schreiben als:

$$\begin{aligned} w^{(r)}(z) = & \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \left(w_\alpha(z) \int_{z_0}^z \frac{\Re (\bar{w}_\gamma s^{(r)})}{C_{\alpha\gamma}} dz - w_\gamma(z) \int_{z_0}^z \frac{\Re (\bar{w}_\alpha s^{(r)})}{C_{\alpha\gamma}} dz \right. \\ & \left. + w_\beta(z) \int_{z_0}^z \frac{\Re (\bar{w}_\delta s^{(r)})}{C_{\beta\delta}} dz - w_\delta(z) \int_{z_0}^z \frac{\Re (\bar{w}_\beta s^{(r)})}{C_{\beta\delta}} dz \right) \quad . \end{aligned} \quad (3.70)$$

Dabei ist

$$s^{(r)} = \left(\frac{d}{dz} \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)'}} - \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)}} \right) m_E^{(r+1)} \quad . \quad (3.71)$$

Die Terme für $s^{(r)}(z)$ sind nur von den Bahnabweichungen $w^{(h)}(z)$ mit $h < r$ abhängig und somit rekursiv berechenbar. Die Aberrationen $w^{(r)}(z)$ lassen sich demnach mit der Integralgleichung (3.70) durch die Methode der *sukzessiven Approximation* berechnen. Diese Gleichung ist einfacher zu lösen, als die Differentialgleichung (3.59).

Der Fall $r = 1$ nimmt einen Sonderfall ein und beschreibt die Lösung des inhomogenen Anteils der paraxialen Bahngleichung (3.35). Die rechte Seite dieser Gleichung ist als Abweichung $s^{(1)}$ erster Ordnung zu behandeln. Der erste Term von $s^{(1)}$ beschreibt eine *schwache* Abweichung w_Γ von einer geraden Achse der Wien–Filter–artigen Systeme. Der zweite Term von $s^{(1)}$ bestimmt die dispersive Bahn, wie in Abschnitt 3.3.2 schon diskutiert.

Der Ausdruck für $s^{(r)}$ lässt sich noch genauer beleuchten. Führt man die Differentiationen direkt aus gelangt man zur Bahnmethode, die z. B. in [Scherzer 1936a] für elektrische und

magnetische Rundlinsen ausgeführt wurde. Die jetzt zu diskutierende Eikonalmethode ist in [Glaser] für elektrische und magnetische Rundlinsen in die Elektronenoptik eingeführt worden und von Rose z. B. in [Rose 1987b] ausführlich behandelt worden. Dabei ist die totale Ableitung nach z in $s^{(r)}$ durch eine partielle Integration zu beseitigen. Die Gleichung (3.69) läßt sich danach schreiben als

$$C_{\nu\mu} G_{\nu}^{(r)} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \Re \left(\left[\bar{w}_{\mu} \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)'}} m_E^{(r+1)} \right]_{z_0}^z - \int_{z_0}^z \left(\bar{w}'_{\mu} \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)'}} + \bar{w}_{\mu} \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)}} \right) m_E^{(r+1)} dz \right) . \quad (3.72)$$

Den Integranden dieser Gleichung kann man noch weiter umformen. Dazu wird die Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial a_{\nu}} m_E^{(r+1)} &= 2\Re \left(\left(\bar{w}'_{\nu} \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)'}} + \bar{w}_{\nu} \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)}} \right) m_E^{(r+1)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{d}{dz} \sum_{l=2}^{r-1} \frac{\partial}{\partial a_{\nu}} \bar{w}^{(l)} \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)'}} m^{(r+2-l)} \right) \end{aligned} \quad (3.73)$$

ausgenutzt, in der die Funktionen $m^{(r)}$ in Abhängigkeit der Anfangsbedingungen a_{ν} und κ geschrieben werden. Diese Gleichung erhält man nach einigen Umformungen, wenn von der Beziehung

$$\frac{\partial}{\partial a_{\nu}} m_E^{(r+1)} = 2\Re \left(\sum_{l=1}^r \left(\frac{\partial}{\partial a_{\nu}} \bar{w}^{(l)} \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(l)}} + \frac{\partial}{\partial a_{\nu}} \bar{w}^{(l)'} \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(l)'}} \right) m_E^{(r+1)} \right) \quad (3.74)$$

ausgehend die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(l)}} m^{(r+1)} = \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)}} m^{(r+2-l)} \quad (3.75)$$

ausgenutzt wird. Die letzte Gleichung läßt sich mit Hilfe von (3.57) bestätigen.

Im letzten Schritt setzt man Gleichung (3.73) in (3.72) ein und erhält nach weiteren Umformungen die Formel ([Hoffstätter 1991]):

$$\begin{aligned} C_{\nu\mu} G_{\nu}^{(r)} &= -\frac{1}{2\sqrt{\varepsilon}} \left(\frac{\partial}{\partial a_{\mu}} \int_{z_0}^z m_E^{(r+1)} dz \right. \\ &\quad \left. - 2\Re \left(\sum_{l=2}^{r-1} \frac{\partial}{\partial a_{\mu}} \bar{w}^{(l)} \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)'}} m^{(r+2-l)} - \left(\bar{w}_{\mu} \frac{\partial}{\partial \bar{w}^{(1)'}} m_E^{(r+1)} \right) \Big|_{z_0} \right) \right) . \end{aligned} \quad (3.76)$$

Für $C_{\nu\mu} \neq 0$ liefert diese Formel Beiträge in den $G_{\nu}^{(r)}$ zur Gleichung (3.65) und läßt sich daher in einer ähnlichen Struktur schreiben wie Gleichung (3.70). Da die Gleichung (3.76)

nicht von den Bahnabweichungen r -ten Ranges abhängt, lassen sich die $w^{(r)}$ wiederum rekursiv berechnen.

Der Vorteil der Eikonalmethode gegenüber der Bahnmethode (3.70) wird erst deutlich, wenn die erste nicht verschwindende Fehlerbahn $w^{(r)}$ berechnet werden soll. Unter der Voraussetzung, daß die Ebene z_0 im feldfreien Raum liegt und den geeigneten Anfangsbedingungen für $w^{(1)}$ in dieser Ebene, gilt die Formel

$$C_{\nu\mu} G_{\nu}^{(r)} = -\frac{1}{2\sqrt{\varepsilon}} \frac{\partial}{\partial a_{\mu}} \int_{z_0}^z m_E^{(r+1)} dz \quad , \quad (3.77)$$

mit der man sich analytisch einen Überblick über die Fehlerintegrale verschaffen kann. Da es in der Berechnung von abbildenden Energiefiltern üblich geworden ist die Eikonalmethode zu verwenden [Degenhardt 1992, Uhlemann 1994], wird in den weiteren Berechnungen der Aberrationen in dieser Arbeit die Gleichung (3.76) verwendet.

Zur Auswertung der Gleichung (3.76) lassen sich Computer-Algebra-Programme ausnutzen. In diesem Fall kam das Programm ©Maple zur Anwendung. Dazu ist vor allem notwendig sich zu verdeutlichen, daß die Funktionen $m^{(r)}$ und $m_E^{(r)}$ sich in verschiedenen Darstellungen angeben lassen. Als Beispiel seien einige Möglichkeiten für das verkürzte Eikonal bis vierten Ranges angegeben:

$$\begin{aligned} m_E^{(2)} &= -m^{(2)} \\ &= -\mu^{(2)} [w^{(1)}] \\ m_E^{(3)} &= \mu^{(3)} [w^{(1)}] \\ m_E^{(4)} &= \mu^{(4)} [w^{(1)}] + D^{(2)} \mu^{(3)} [w^{(1)}] + \frac{1}{2} D^{(2)^2} \mu^{(2)} [w^{(1)}] \\ &= \mu^{(4)} [w^{(1)}] + D^{(2)} \mu^{(3)} [w^{(1)}] + \mu^{(2)} [w^{(2)}] \\ &= \mu^{(4)} [w^{(1)}] + \frac{1}{2} D^{(2)} m^{(3)} + \frac{1}{2} D^{(2)} \mu^{(3)} [w^{(1)}] \\ &= \mu^{(4)} [w^{(1)}] + D^{(2)} m^{(3)} - \frac{1}{2} D^{(2)^2} \mu^{(2)} [w^{(1)}] \\ &= \mu^{(4)} [w^{(1)}] + D^{(2)} m^{(3)} - \mu^{(2)} [w^{(2)}] \end{aligned}$$

Zu diesen Formeln sind Ableitungsregeln zu definieren, Taylorreihen bzgl. den Koordinaten w, \bar{w}, w', \bar{w}' und κ zu bilden und nach dem Rang r zu sortieren. Die entstehenden Ausdrücke für die Bahnabweichungen $w^{(r)}$ lassen sich in diesen Computer-Algebra-Programmen als FORTRAN- oder C-Programmtext ausgeben und compilieren. Da diese Ausdrücke vor allem für hohe Ränge ziemlich groß werden, wird in dieser Arbeit darauf verzichtet, sie explizit anzugeben. Im endgültigen Programm muß nur noch der reale Randfeldverlauf der elektrischen und magnetischen Felder berücksichtigt werden. Einige Überlegungen zu diesem Thema sollen im anschließendem Abschnitt 3.4 diskutiert werden.

3.4 Methoden zur Berechnung des Potentials eines Multipolelements

Im Abschnitt 3.2 wurden ebene Multipolfelder $\Phi_\nu(z)$ und $\Psi_\nu(z)$, $\nu = 0, 1, \dots$ eingeführt. Dazu muß man den Randfeldverlauf in Abhängigkeit der Bogenlänge z noch nicht festlegen. In diesem Kapitel werden mehrere Möglichkeiten der Randfeldberechnung dargestellt. Dabei wird auf eine analytische Darstellung der Felder Wert gelegt. Die Berechnung der paraxialen Fundamentalbahnen und der Aberrationen des elektronenoptischen Systems ist dann für eine gerade optische Achse geschlossen durchführbar.

Der erste Teilabschnitt ist der analytischen Lösung der Laplace-Gleichung durch die Separation der Variablen in Zylinderkoordinaten gewidmet. Die so erhaltene Lösung des Potentialproblems wird im zweiten Abschnitt durch ein numerisches phasenmoduliertes Ringladungsmodell bestätigt. Zum Abschluß wird ein Verfahren zur Abschätzung der Potentiale und Ampère-Windungen auf den Elektroden und Polschuhen beschrieben.

3.4.1 Analytische Näherung des Potentials

Die Laplacegleichung für das elektrische Potential soll für den dreidimensionalen Fall gelöst werden. Für eine gerade optische Achse sind die Zylinderkoordinaten (ρ, ϑ, z) zur Lösung dieses Problems geeignet. Vorausgesetzt werden soll eine Geometrie nach **Abb. 3.3**.

Mit Hilfe der Methode der Separation der Variablen in Zylinderkoordinaten [Jackson] läßt sich eine allgemeine Lösung der Laplacegleichung angeben:

$$\varphi(\rho, \vartheta, z) = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} A_\nu(k) e^{i\nu\vartheta} e^{ikz} I_{|\nu|}(k\rho) dk \quad . \quad (3.78)$$

Wie leicht zu erkennen ist, wird die Lösung für den azimutalen Anteil der Laplacegleichung durch eine Fourierzerlegung nach den Zähligkeiten ν , die z Abhängigkeit durch ein Fourierintegral in der Variablen k und die radiale Abhängigkeit der Lösung durch die modifizierten Besselfunktionen $I_\nu(k\rho)$ dargestellt.

In den weiteren Überlegungen muß eine Randbedingung für das Potential $\varphi(R, \vartheta, z)$ auf dem Kreis mit dem Radius R angenommen werden. Für $z \rightarrow \infty$ hingegen soll das Potential verschwinden. In diesem Fall lassen sich die Orthogonalitätsbedingungen

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} e^{i(\nu-\nu')\vartheta} d\vartheta &= 2\pi\delta_{\nu\nu'} \quad , \\ \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')\rho} d\rho &= 2\pi\delta(k-k') \end{aligned}$$

ausnutzen, um die noch unbekannten Koeffizienten $A_\nu(k)$ zu berechnen. Dabei bedeuten $\delta_{\nu\nu'}$ das Kroneckersymbol und $\delta(k - k')$ die Dirac'sche Deltafunktion. Die entstandene Integralgleichung

$$\varphi(\rho, \vartheta, z) = \frac{1}{4\pi^2} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \varphi(R, \tilde{\vartheta}, \tilde{z}) e^{-i\nu\tilde{\vartheta}} e^{-ik\tilde{z}} d\tilde{\vartheta} d\tilde{z} \quad (3.79)$$

$$e^{i\nu\vartheta} e^{ikz} \frac{I_{|\nu|}(k\rho)}{I_{|\nu|}(kR)} dk$$

ist dabei zu lösen.

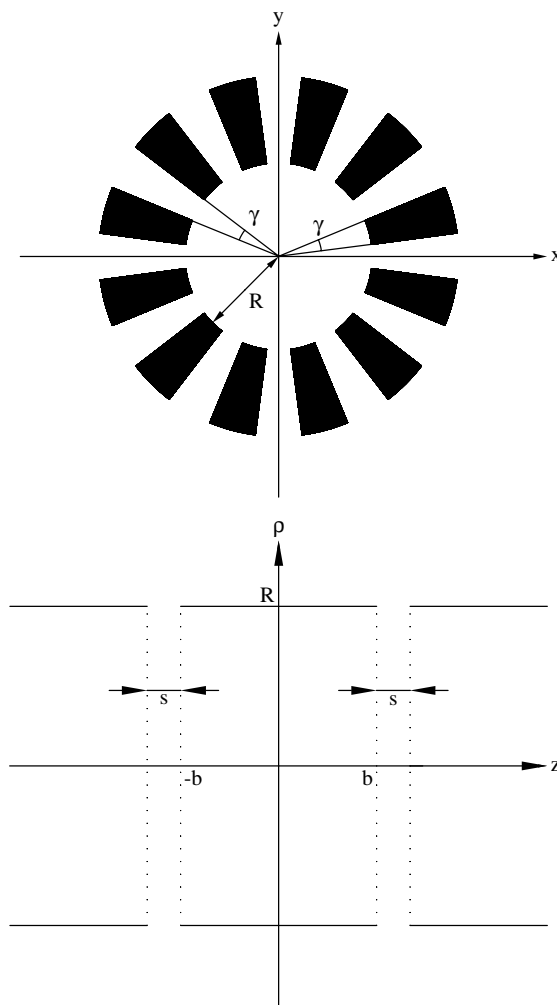


Abbildung 3.3: Die angenommene Polschuhgeometrie eines Multipols in der xy und der ρz Ebene.

Der einfachst denkbare Fall ist eine *lineare Näherung* (Abb. 3.4) der Potentiale in den Zwischenräumen der Elektroden in Abb. 3.3. Das Potential auf den Elektroden ist konstant an-

genommen. Eine ähnliche Näherung für Sektorfeldmagneten wurde von [Uhlemann 1994, Preikszas 1995] untersucht. Dieses Problem ist allerdings zweidimensional. Die Randwertbedingung läßt sich auch separieren in der Form

$$\varphi(R, \vartheta, z) = f(z) \cdot \sum_{\lambda=1}^{2N} g_{\lambda}(\vartheta) \cdot V_{\lambda} \quad . \quad (3.80)$$

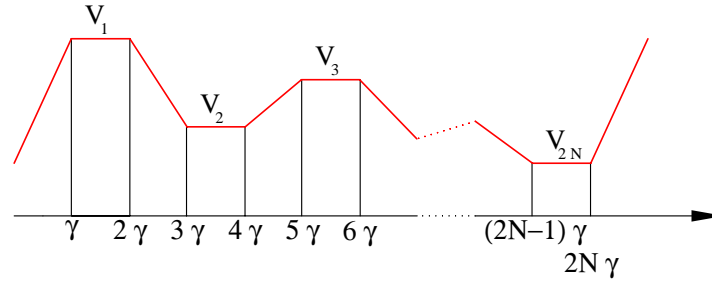


Abbildung 3.4: Die angenommene Randbedingung für das Potential eines Multipolelements in azimuthaler Richtung. Die Kästen geben die Lage der Polschuhe und die rote Linie die lineare Näherung des Potentials an.

Die Spannung V_{λ} ist auf dem λ -sten Pol des $2N$ poligen Multipoles angelegt und läßt sich für alle diese Pole, wie in **Abb. 3.4** dargestellt, superpositionieren. Innerhalb dieser linearen Näherung läßt sich der azimuthale Beitrag eines Poles zu

$$g_1(\vartheta) = \begin{cases} 0 & : \vartheta < 0 \\ \frac{\vartheta}{\gamma} & : \vartheta \in [0, \gamma] \\ 1 & : \vartheta \in [\gamma, 2\gamma] \\ \frac{1}{\gamma}(-\vartheta + 3\gamma) & : \vartheta \in [2\gamma, 3\gamma] \\ 0 & : \vartheta > 3\gamma \end{cases} \quad (3.81)$$

und der z abhängige Beitrag zu

$$f(z) = \begin{cases} 0 & : z < -(b+s) \\ \frac{1}{s}(z+b+s) & : -(b+s) \leq z < -b \\ 1 & : -b \leq z < b \\ \frac{1}{s}(-z+b+s) & : b \leq z < b+s \\ 0 & : z \geq b+s \end{cases} \quad (3.82)$$

schreiben. Dies kann in Gleichung (3.79) eingesetzt werden. Dadurch ergibt sich eine zusätzliche Summation über alle Elektroden λ :

$$\begin{aligned} \varphi(\rho, \vartheta, z) = & \frac{1}{4\pi^2} \sum_{\lambda=0}^{2N} V_\lambda \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} f(\tilde{z}) g_\lambda(\tilde{\vartheta}) e^{-i\nu\tilde{\vartheta}} e^{-ik\tilde{z}} d\tilde{\vartheta} d\tilde{z} \\ & e^{i\nu\vartheta} e^{ikz} \frac{I_{|\nu|}(k\rho)}{I_{|\nu|}(kR)} dk. \end{aligned} \quad (3.83)$$

Die Integrationen über \tilde{z} und $\tilde{\vartheta}$ lassen sich einfach ausführen. Das komplette Potential ergibt sich durch eine einfache Superpositionsüberlegung nur mit Hilfe der Funktion $g_1(\vartheta)$. Durch Drehen der ersten Elektrode lassen sich alle $2N$ Elektroden der **Abb. 3.3** ohne erneute Berechnung der Fourierkoeffizienten über eine Integration beschreiben. Die Drehung für jeden der $2N$ Pole läßt sich durch den Term $\exp(-i\nu(2\lambda-1)\gamma)$ erzeugen. Abschließend muß jeder Beitrag einer Elektrode superpositioniert werden. Als vorläufiges Ergebnis läßt sich

$$\varphi(\rho, \vartheta, z) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\nu=0}^{\infty} \mathcal{R}_\nu(\rho, z) \sum_{\lambda=1}^{2N} V_\lambda \Re(\mathcal{K}_\nu e^{i\nu(\vartheta-(2\lambda-1)\gamma)}) \quad (3.84)$$

angeben, mit

$$\mathcal{K}_\nu = \frac{8}{\pi\gamma\nu^2(1+\delta_{0\nu})} \sin\left(\nu\frac{\gamma}{2}\right) \sin(\nu\gamma) \quad (3.85)$$

und

$$\mathcal{R}_\nu(\rho, z) = \frac{4}{s} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k^2} \sin\left(k\frac{s}{2}\right) \sin\left(k\frac{2b+s}{2}\right) \frac{I_{|\nu|}(k\rho)}{I_{|\nu|}(kR)} e^{ikz} dk. \quad (3.86)$$

Dieses letzte Integral kann mit Hilfe des Residuen Satzes [Dallmann, Elster] gelöst werden. Dazu ist festzustellen, daß in $k = 0$ eine zweifache Singularität im Integranden existiert. Dazu kommen die abzählbar unendlich vielen Nullstellen der modifizierten Besselfunktion $I_{|\nu|}(kR)$, wobei die Nullstellen für $k = 0$ nach einer Grenzwertbetrachtung $k \rightarrow 0$ [Abramowitz, Stegun] in dem Bruch mit den modifizierten Besselfunktionen immer hebbar sind. Sonst gilt nach [Abramowitz, Stegun], daß alle Residuen dieser Besselfunktionen auf der imaginären Achse in der komplexen k -Ebene liegen.

Zur Berechnung von Residuen müssen immer geschlossene Integrationswege in der komplexen k -Ebene angenommen werden. Da das zu lösende Integral (3.86) den Integrationsweg auf der reellen Achse vorgibt, muß dieser im Unendlichen geschlossen werden. Um den Wert des Integrales (3.86) zu erhalten, darf dieser zusätzliche Integrationsweg keinen Beitrag liefern. Zu diesem Zweck läßt sich ausnutzen, daß die Sinusfunktionen in Exponentialfunktionen umgeschrieben werden können und sich mit dem Term $\exp(ikz)$ zusammenfassen lassen. Solange das Argument der Exponentialfunktion auf diesem zusätzlichen Integrationsweg reell und negativ ist, ist die Integration über diesen Teil des Weges Null. Dies führt zu einer Fallunterscheidung in der Variablen z . Die auftretenden Terme der Exponentialfunktion werden so sortiert, daß sie im Unendlichen exponentiell gedämpft sind. Der Integrationsweg

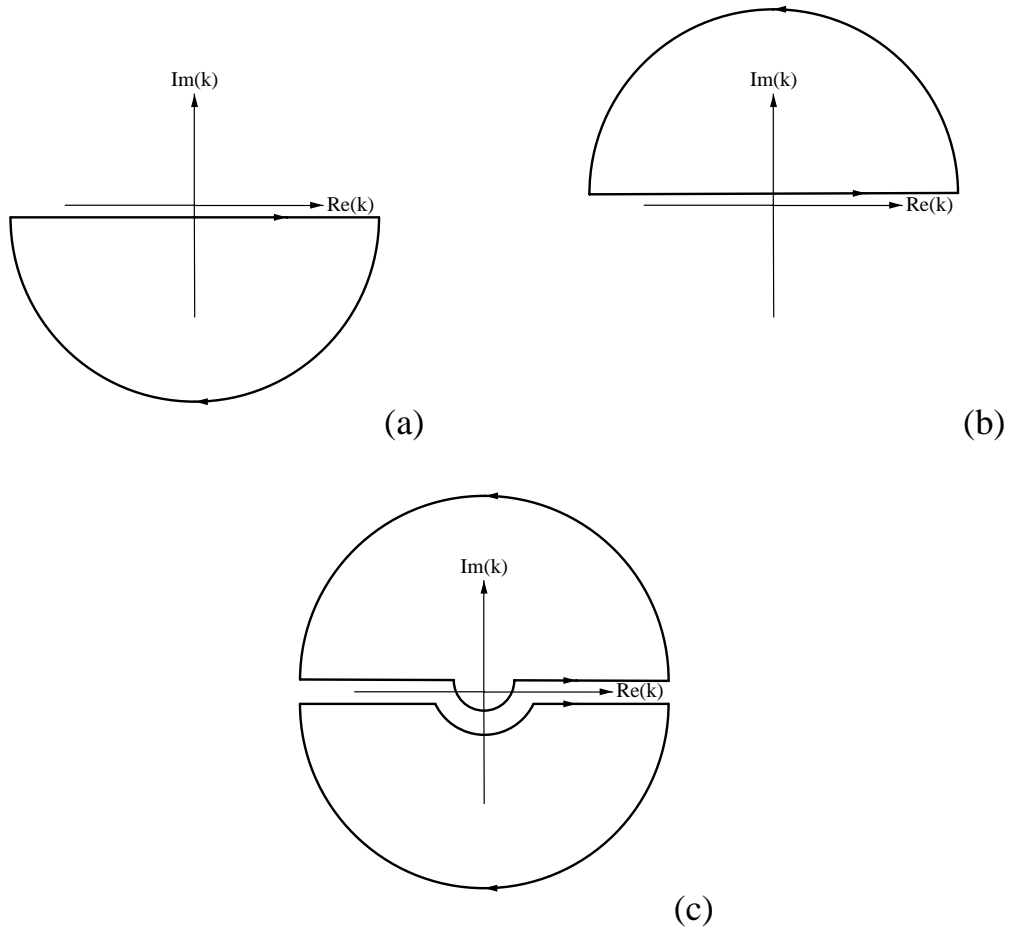


Abbildung 3.5: Integrationswege in der komplexen k -Ebene für die verschiedenen Fallunterscheidungen der Werte von z .

muß dabei in der oberen bzw. unteren komplexen Halbebene geschlossen (s. **Abb. 3.5**) werden. Für einen Fall können nach dieser Sortierung durchaus mehrere Integrale zu lösen sein. Die **Abb. 3.5 (a)** steht für den Fall $z < -(b + s)$, die **Abb. 3.5 (b)** für den Fall $z > b + s$ und die **Abb. 3.5 (c)** für die Intervalle $z \in [-b, b]$, $z \in [-(b + s), -b]$ und $z \in [b, b + s]$. Die Fälle für die **Abb. 3.5 (c)** unterscheiden sich in den Beiträgen der Exponentialfunktionen zu den Residuen in den einzelnen Integrationswegen.

Besondere Beachtung muß dem Term $1/k^2$, der zweifachen Singularität in (3.86), geschenkt werden. In der Form in der Gleichung (3.86) hier dargestellt wird, sind die Singularitäten für diesen Term mit den Sinusfunktionen hebbar und die Residuen somit Null. Die zuvor geschilderte Zerlegung in Exponentialfunktionen und das Sortieren in verschiedene Integrationswege macht dieses Argument zunichte. Auch dies läßt sich an den Ausbuchtungen in **Abb. 3.5 (c)** ablesen. Gerade die Beiträge dieser Residuen zum Potential spielen eine ent-

scheidende Rolle für die **Festlegung der maximalen Feldstärke**, wie in Abschnitt 3.4.3 diskutiert. Alle **anderen Residuen** definieren das Randfeld des Multipoles mit der Zähligkeit ν .

Nachdem das letzte Integral gelöst wurde, läßt sich eine analytische Lösung der Laplacegleichung für die Dirichlet Randwertbedingung auf konst. Radius R in linearer Näherung angeben. Für $|z| > b + s$ gilt:

$$\begin{aligned} \varphi(\rho, \vartheta, z) = & \frac{2}{Rs} \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\lambda=1}^{2N} V_{\lambda} \Re \left(\mathcal{K}_{\nu} e^{i\nu(\vartheta - (2\lambda-1)\gamma)} \right) \\ & \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{c_{\nu n}^2} e^{-c_{\nu n}|z|} \sinh \left(c_{\nu n} \frac{s}{2} \right) \sinh \left(c_{\nu n} \frac{2b+s}{2} \right) \frac{J_{\nu}(c_{\nu n}\rho)}{J_{\nu+1}(j_{\nu n})} . \end{aligned} \quad (3.87)$$

In dem Fall $z \in [-b, b]$ erhält das Potential die Form:

$$\begin{aligned} \varphi(\rho, \vartheta, z) = & \frac{2}{Rs} \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\lambda=1}^{2N} V_{\lambda} \Re \left(\mathcal{K}_{\nu} e^{i\nu(\vartheta - (2\lambda-1)\gamma)} \right) \\ & \left(\frac{s}{4} \frac{\rho^{\nu}}{R^{\nu-1}} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{c_{\nu n}^2} e^{-c_{\nu n} \frac{2b+s}{2}} \sinh \left(c_{\nu n} \frac{s}{2} \right) \cosh(c_{\nu n} z) \frac{J_{\nu}(c_{\nu n}\rho)}{J_{\nu+1}(j_{\nu n})} \right) . \end{aligned} \quad (3.88)$$

Für das letzte Intervall $|z| \in [b, b+s]$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} \varphi(\rho, \vartheta, z) = & \frac{1}{Rs} \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\lambda=1}^{2N} V_{\lambda} \Re \left(\mathcal{K}_{\nu} e^{i\nu(\vartheta - (2\lambda-1)\gamma)} \right) \left(\frac{s+b-|z|}{2} \frac{\rho^{\nu}}{R^{\nu-1}} \right. \\ & \left. + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{c_{\nu n}^2} (e^{-c_{\nu n}(b+s)} \cosh(c_{\nu n} z) - e^{-c_{\nu n}|z|} \cosh(c_{\nu n} b)) \frac{J_{\nu}(c_{\nu n}\rho)}{J_{\nu+1}(j_{\nu n})} \right) . \end{aligned} \quad (3.89)$$

Dabei sind für diese Gleichungen die Besselfunktionen $J_{\nu}(x)$ mit deren Nullstellen $j_{\nu n}$ verwendet worden. Die Zahlen $c_{\nu n} = j_{\nu n}/R$ sind die auf den Radius R normierten Nullstellen $j_{\nu n}$.

Für eine numerische Auswertung dieser Formeln sind in erster Linie die Berechnung der Nullstellen $j_{\nu n}$ wichtig. Dazu ist in [Abramowitz, Stegun] eine Näherungsformel angegeben, die gegebenenfalls durch Nachiteration verbessert werden kann. Die Ordnung des Summationsindex n ist nur für die Ebenen $|z| = b$ und $|z| = b+s$ von Bedeutung. Der Wert $n < 1000$ ist dort völlig ausreichend. Die ebenen Multipole $\Phi_{\nu}(z)$ aus Abschnitt 3.2 lassen sich durch kleine Werte von $\rho \ll R$ berechnen. Eine Entwicklung der Besselfunktionen $J_{\nu}(c_{\nu n}\rho)$ nach ihrem Argument ist in diesem Fall ungeschickt, da die resultierende Reihe für das Potential für gewisse Werte von z dann nicht konvergiert. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, daß die Lösung nach der Entwicklung der Besselfunktionen schon in der in Gleichung (3.17) gewünschten Form in den Termen $\frac{\rho^{\nu}}{R^{\nu}}$ angegeben ist und durch Koeffizientenvergleich die Funktionen $\Phi_{\nu}(z)$ leicht festzulegen wären. Die Besselfunktionen müssen

in ihrer Reihendarstellung geschrieben werden und die gesamte Reihe nach den Potenzen von ρ^ν sortiert werden. Die resultierende Reihe $\Phi_\nu(z)$ entspricht der gewünschten Darstellung (3.17), konvergiert aber nicht. Das läßt sich am Nenner der Reihen (3.87, 3.88, 3.89), in dem $c_{\nu n}$ nur quadratisch vorkommt, erkennen. Die Besselfunktionen im Zähler liefern Beiträge in $c_{\nu n}$ mit beliebiger Ordnung. Dabei ließe sich eine äquivalente Formel zu (3.17) mit Randfeldverlauf angeben.

Auch eine Berechnung der magnetischen ebenen Multipole $\Psi_\nu(z)$ aus Abschnitt 3.2 ist möglich, solange eine sehr große Permeabilität μ vorausgesetzt wird, so daß die Polschuhoberflächen als Äquipotentialflächen angesehen werden dürfen. Damit wurde in diesem Abschnitt die Berechnung der elektrischen und magnetischen axialen Multipolkoeffizienten $\Phi_\nu(z)$ und $\Psi_\nu(z)$ in den Gleichungen (3.87), (3.88) und (3.89) dargestellt. In den folgenden Abschnitten werden diese Ergebnisse bestätigt und für praktische Erwägungen ausgewertet.

3.4.2 Ersatzladungsmethode

Im vorangehenden Abschnitt 3.4.1 wurde eine analytische Näherungsmethode zur Berechnung der Randfelder der ebenen Multipolkoeffizienten $\Phi_\nu(z)$ geschildert. Da die direkte Auswertung der Formeln für die axialen Felder für bestimmte Werte von z divergiert, müssen sie in der Näherung kleiner Werte $\rho \ll R$ numerisch berechnet werden. Außerdem ist die ausreichende Genauigkeit der Reihe über n für $n < 1000$ zu bestätigen. Dazu soll ein zweites Verfahren an dieser Stelle angegeben werden, mit der sich das Potential eines Multipolelements mittels eines Ersatzladungsverfahrens berechnen läßt.

Für dieses Problem sollen folgende angepaßte Ersatzladungselemente verwendet werden. Die Poissongleichung ist dabei zu lösen. Da für die Anwendung der Ersatzladungselemente eine Dirichlet Randbedingung für verschwindendes Potential im Unendlichen notwendig ist, kann die Lösung mit Hilfe einer Green'schen Funktion [Großmann] dargestellt werden. Mit anderen Worten wird das Coulomb'sche Gesetz

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (3.90)$$

angewendet. Die spezifische Ladungsdichte $\rho(\mathbf{r})$ in dieser Gleichung wird in einer für ebene Multipole angepaßten Form

$$\frac{\rho_\nu(\mathbf{r})}{4\pi\epsilon_0} = \delta(\rho - R) \delta(z - a) \frac{Q_\nu e^{i\nu\vartheta}}{2\pi R} \quad (3.91)$$

geschrieben. In Zylinderkoordinaten ist dies eine mit trigonometrischen Funktionen im Azimutwinkel modulierte Ringladung. Die Geometrie des Ersatzladungselementes zeigt **Abb. 3.6**. In der Größe $Q_\nu := \frac{q_\nu}{4\pi\epsilon_0}$ bedeutet q_ν die Ladungsstärke in Coulomb, ϵ_0 die Dielektrizitätskonstante im Vakuum und ν die Zähligkeit des zugehörigen ebenen Multipols.

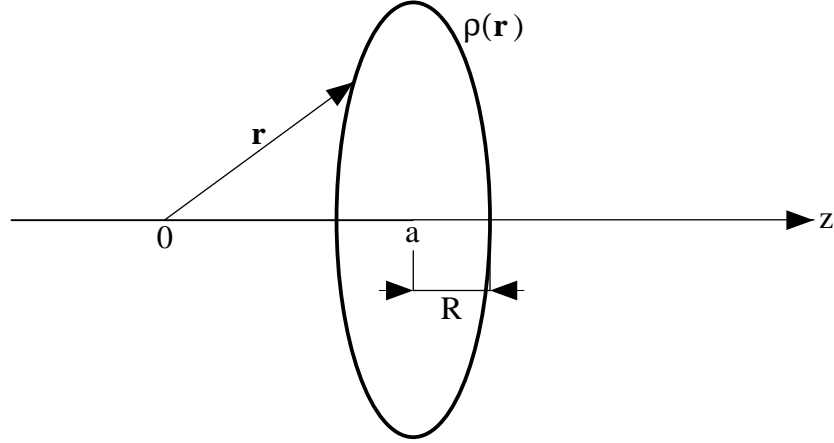


Abbildung 3.6: Die angenommene spezifische Ringladungsdichte.

Das Integral (3.90) läßt sich nach einfachen Umformungen schreiben als

$$\varphi_\nu(\mathbf{r}) = \frac{Q_\nu k}{2\pi\sqrt{\rho R}} e^{i\nu\vartheta} \int_0^{2\pi} \frac{e^{i\nu\alpha}}{\sqrt{1 - k^2 \cos^2 \frac{\alpha}{2}}} d\alpha \quad . \quad (3.92)$$

Die Integrationen über die δ -Distributionen sind elementar. Außerdem wurde das Additionstheorem

$$1 + \cos(\alpha) = 2 \cos^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) \quad (3.93)$$

verwendet. Die dimensionslose Größe

$$k^2 = \frac{4\rho R}{(\rho + R)^2 + (z - a)^2} \quad (3.94)$$

wurde als Abkürzung eingeführt, wobei sich leicht zeigen läßt, daß $k < 1$ gilt. Dies läßt sich überführen in:

$$\varphi_\nu(\mathbf{r}) = (-1)^\nu \frac{2Q_\nu k}{\pi\sqrt{\rho R}} e^{i\nu\vartheta} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos(2\nu\alpha)}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2(\alpha)}} d\alpha \quad . \quad (3.95)$$

Nach [Abramowitz, Stegun] läßt sich das verbliebene Integral zumindest für Rundlinsen und Dipole durch elliptische Integral beschreiben. Mit Hilfe der Formel [Bronstein]

$$\cos(n\alpha) = \sum_{\substack{k=0 \\ n-2k \geq 0}}^n (-1)^k \binom{n}{2k} \cos^{n-2k}(\alpha) \sin^{2k}(\alpha) \quad , \quad (3.96)$$

wobei sich die auftretenden Cosinusausrücke mit Hilfe der binomischen Formel in Sinusfunktionen umwandeln lassen; für die Sinusfunktionen läßt sich wiederum die binomische Formel anwenden; verbleibt ein mit Hilfe von (15.3.1) [Abramowitz, Stegun] (Substitution $x = \sin^2 \alpha$) lösbares Integral. Als Ergebnis erhält man die Gleichung

$$\varphi_\nu(\mathbf{r}) = \frac{Q_\nu}{\sqrt{\rho R}} e^{i\nu\vartheta} \sum_{l=0}^{\nu} \sum_{m=0}^{\nu-l} \sum_{n=0}^{m+l} (-1)^{\nu+m+l+n} \binom{2\nu}{2l} \binom{\nu-l}{m} \binom{m+l}{n} \quad (3.97)$$

$$\frac{1}{k^{2(m+l)-1}} F\left(\frac{1}{2} - n, \frac{1}{2}, 1; k^2\right)$$

für das Potential. Die Funktionen $F(a, b, c; z)$ bezeichnen dabei die hypergeometrischen Funktionen aus dem zitierten Kapitel von [Abramowitz, Stegun]. Besonders betont werden soll dabei, daß für den Konvergenzradius $k^2 < 1$ diese Reihe konvergiert (für $n > 0$ sogar absolut). Der Ausnahmefall $k = 1$ entspricht einem Ort auf dem Ring. Physikalisch bedeutet die dort postulierte Ladung eine Polstelle des Potentials (Lösung der Poissonsgleichung, nicht der Laplacegleichung).

Durch die Verwendung verschiedener Additionstheoreme für trigonometrische Funktionen lassen sich noch andere Darstellungen der Lösung angeben. Ein Beispiel ist:

$$\varphi_\nu(\mathbf{r}) = \frac{Q_\nu}{\sqrt{\rho R}} e^{i\nu\vartheta} \sum_{l=0}^{\nu} \sum_{m=0}^{\nu-l} (-1)^{\nu+m+l} \binom{2\nu}{2l} \binom{\nu-l}{m} \frac{\prod_{n=1}^{m+l} (2n-1)}{2^{m+l} (m+l)!} \quad (3.98)$$

$$k F\left(\frac{1}{2}, m+l+\frac{1}{2}, m+l+1; k^2\right) \quad .$$

In dieser Reihe läßt sich allerdings nur Konvergenz, keine absolute Konvergenz, für die hypergeometrischen Funktionen erreichen. Die Ringladung selbst ($k = 1$) ist wiederum angenommen.

Die relativ kompliziert aussehenden Summen in (3.97) lassen sich für niedrige Zähligkeiten wie folgt vereinfachen:

- $\nu = 0$ Rundlinse

$$\phi_0(\mathbf{r}) = \frac{Q_0}{\sqrt{\rho R}} k F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1; k^2\right) \quad (3.99)$$

- $\nu = 1$ Dipol

$$\phi_1(\mathbf{r}) = \frac{Q_1}{\sqrt{\rho R}} \frac{e^{i\vartheta}}{k} \left((2 - k^2) F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1; k^2\right) - 2 F\left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1; k^2\right) \right) \quad (3.100)$$

- $\nu = 2$ Quadrupol

$$\begin{aligned} \phi_2(\mathbf{r}) = \frac{Q_2}{\sqrt{\rho R}} \frac{e^{2i\vartheta}}{k^3} & \left((k^4 - 8k^2 + 8) F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1; k^2\right) \right. \\ & + 8(k^2 - 2) F\left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1; k^2\right) \\ & \left. + 8 F\left(-\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, 1; k^2\right) \right) \end{aligned} \quad (3.101)$$

Auf diese Weise lassen sich die Multipole niedriger Zähligkeit leicht berechnen.

Um das komplette Potential zu bestimmen, müssen alle Zähligkeiten ν berücksichtigt werden. Mit anderen Worten muß die Konvergenz einer Fourierreihe kontrolliert und das dazu notwendige maximale ν bestimmt werden. Da aber die zu bestimmenden Funktionen $\Phi_\nu(z)$ in Gleichung (3.17) schon in einer Fourierreihe im Azimutwinkel vorliegen, ist ein nahe liegendes Vorgehen auch eine Fouriertransformation der Randwerte des Potentials vorzunehmen. Um dabei die Funktionen $\Phi_\nu(z)$ direkt zu berechnen, muß die Einschränkung der Randwertbedingung für konstanten Radius $\rho = R$ wie in Abschnitt 3.4.1 vorgenommen werden. Dabei kann für jede Zähligkeit ν eine eigene Randwertanpassung in diesem „Fourierraum“ vorgenommen werden, ohne Konvergenzaussagen für die eigentliche Fourierreihe treffen zu müssen. Führt man dieses Vorgehen für die Randwertbedingung an das Potential in Abschnitt 3.4.1 aus, lassen sich die dort gefundenen Gleichungen zur Berechnung des Potentials bestätigen. Dazu reichen 100 Ringladungen völlig aus. Beide geschilderten Verfahren zur Berechnung des Potentials liefern demzufolge bis auf numerische Abweichungen das gleiche Ergebnis. Rechenfehler sind damit ausgeschlossen.

3.4.3 Abschätzung der Ampèrewindungen auf den Polschuhen

In Abschnitt 3.4.1 ist eine dreidimensionale Näherung des Potentials durchgeführt worden. Für die Abschätzung ist eine zweidimensionale Berechnung der Potentiale und Ampèrewindungen auf den Elektroden und Polschuhen ausreichend. Dies entspricht einem unendlich langen Multipol aus Abschnitt 3.4.1 und führt in diesem Fall zu den gleichen Formeln. Eine lineare Näherung des Verlaufs des Potentials ist hier nur für const. R in azimuthaler Richtung notwendig (s. **Abb. 3.3**). Völlig analog wie in Abschnitt 3.4.1 muß eine Fouriertransformation durchgeführt werden. Die Ergebnisse dieser Rechnung wurden in den Artikeln [Haider 1982, Rose 1987a] dargestellt. Man erhält die Gleichungen für die ebenen Multipol-

koeffizienten

$$\Phi_\nu = \frac{4}{\pi\gamma\nu^2 R^\nu (1 + \delta_{0\nu})} \sin\left(\nu \frac{\gamma}{2}\right) \sin\left(\nu \frac{\pi}{2N}\right) \sum_{n=1}^{2N} V_n e^{i\nu \frac{\pi}{N}(n - \frac{1}{2})} \quad . \quad (3.102)$$

Ein Potential Φ_0 für eine Rundlinse ergibt sich demnach nur, wenn die Summe über alle Spannungen V_n auf den Elektroden ungleich Null ist. In Abschnitt 3.4.1 bedeutet dies, daß die resultierende Summe der Spannung auf den in z-Richtung mittleren Elektroden in **Abb. 3.3** verschieden von denen der äußeren Elektroden sein muß.

In den Artikeln [Haider 1982, Rose 1987a] werden Ansätze vorgeschlagen, mit denen die einzelnen Multipolfelder unabhängig voneinander erregt werden können. Ein Multipol mit einer Symmetrieachse in x-Richtung ($\Phi_{\nu,s} = 0$) ergibt sich mit Hilfe von

$$V_n = V_{\nu 1} \frac{\cos\left(\nu \frac{\pi}{2N} (2n - 1)\right)}{\cos\left(\nu \frac{\pi}{2N}\right)} \quad , \quad (3.103)$$

mit Symmetrieachse in y-Richtung ($\Phi_{\nu,c} = 0$) mit dem Ansatz

$$V_n = V_{\nu 1} \frac{\sin\left(\nu \frac{\pi}{2N} (2n - 1)\right)}{\sin\left(\nu \frac{\pi}{2N}\right)} \quad , \quad (3.104)$$

wobei $V_{\nu 1}$ jeweils die an der ersten Elektrode angelegte Spannung angibt. Setzt man diese Ansätze (3.103, 3.104) in Gleichung (3.102) ein, ersetzt die trigonometrischen Funktionen durch komplexe Exponentialfunktionen und nutzt die Summenformel für geometrische Reihen aus, ergeben sich für die ebenen Multipolkoeffizienten im ersten Fall die Gleichung

$$\Phi_{\nu,c} = \frac{4N}{\pi\gamma\nu^2 R^\nu} V_{\nu 1} \sin\left(\nu \frac{\gamma}{2}\right) \tan\left(\nu \frac{\pi}{2N}\right) \quad (3.105)$$

und im zweiten Fall die Gleichung

$$\Phi_{\nu,s} = \frac{4N}{\pi\gamma\nu^2 R^\nu} V_{\nu 1} \sin\left(\nu \frac{\gamma}{2}\right) \quad . \quad (3.106)$$

Für $\nu' \neq \nu$ verschwinden die Multipolkoeffizienten wie gefordert. Damit sind die Potentialbelegungen für eine unabhängige Erregung der ebenen Multipolkoeffizienten durch die Gleichungen (3.103, 3.104) vorgegeben. Die Stärke des Koeffizienten berechnet sich durch die Gleichungen (3.105, 3.106). Eine Ausnahme bilden die Fälle $\nu = 0$ und $\nu = N$. Nach [Rose 1987a] lassen sich für große Permeabilitäten der Polschuhe $\mu \gg 1$ auch die Ampèrewindungen abschätzen. Man kann dann ein magnetisches Potential ψ für die Rechnungen verwenden. Die Ampèrewindungen auf den Polschuhen ergeben sich durch die Substitution

$$V_n \longrightarrow \psi_n = \mu_0(mI)_n \quad . \quad (3.107)$$

Zur Herleitung läßt sich der Stoke'sche Satz und geeignete Integrationswege verwenden. Der Term $(mI)_n$ gibt die Ampèrewindungen des n -ten Polschuhes an. Die Größe μ_0 ist die

Permeabilitätskonstante für Vakuum. Damit lassen sich im Rahmen dieser linearen Näherung die Spannungsbelegung auf den Elektroden und die Ampèrewindungen auf den Polschuhen angeben.

Um Rundlinsenfelder zu vermeiden muß, wie schon geschildert, die Bedingung

$$\sum_{n=1}^{2N} V_n = 0 \quad (3.108)$$

gelten. Bei den meisten Elementen sind kombinierte Rundlinsen und Multipolfelder unerwünscht, so daß diese Bedingung eine hervorragende Kontrollmöglichkeit bietet. Weiterhin ist zu beachten, daß alle Rechnungen für ein festes N durchgeführt wurden. Dies bedeutet, daß eine unabhängige Erregung der Multipole nur für Felder mit niedrigerer Zähligkeit als die Hälfte der Anzahl der Elektroden $2N$ des Multipolelementes möglich ist. Felder mit höherer Zähligkeit (höhere harmonische) lassen sich nicht vermeiden. Aus diesem Grund sollte die Anzahl der Elektroden möglichst groß gewählt werden. In [Haider 1982] wurde aus diesem Grund eine Dodekapol Linse vorgeschlagen, da für diesen Fall alle Felder, die Bildfehler bis einschließlich fünften Ranges hervorrufen, durch obige Gleichungen einstellbar sind.

3.5 Analytische Methoden zur Berechnung der Fundamentalbahnen

Um die Abbildung von elektronenoptischen Elementen zu charakterisieren, müssen verschiedene Bedingungen an die paraxialen Bahnen gestellt werden. Ein Beispiel solcher Bedingungen wurden anhand der Gleichungen (3.51, 3.52) diskutiert. Meist möchte man auch die Vergrößerung in beiden Schnitten noch festlegen. Ziel dieses Abschnittes ist es, einen möglichst einfachen Zugang zur Berechnung einer solchen *Fokussierung* zu beschreiben. Dabei wird die paraxiale Differentialgleichung (3.35) analytisch gelöst.

Im ersten Teil dieses Abschnittes werden die Randfelder des elektromagnetischen Feldes vernachlässigt. Der zweite Teil diskutiert eine Näherung, in der die Brechung der Elektronenstrahlen in einer Ebene erfolgt. Damit wird es möglich alle Systeme, die zu den gewünschten Fokussierungsbedingungen führen, zu untersuchen. Diese Näherungen müssen natürlich abschließend unter Berücksichtigung einer korrekten Lösung der Laplacegleichung mit Randfeld verfeinert werden.

3.5.1 Vernachlässigung des Randfeldes

Die erste Näherungsannahme ist ein stückweise konstantes Feld längs der Ausdehnung entlang der z -Achse. Dies wird als SCOFF-Näherung (sharp cut of fringe fields) bezeichnet. In

diesen Fällen läßt sich die paraxiale Differentialgleichung (3.35) in den meisten Fällen analytisch lösen. Der Bereich der Wirkung des Feldes wird dabei so angepaßt, daß das Integral über den realen ebenen Multipolkoeffizient der Fläche des angenommenen Rechtecks entspricht, wie in **Abb. 3.7** dargestellt. Dies ist nur für Quadrupole (Zähligkeit $\nu = 2$) sinnvoll, da nur solche Felder linear in der Differentialgleichung (3.35) auftreten. Für Rundlinsenfelder ($\nu = 0$) sollte die Brechkraft angepaßt werden.

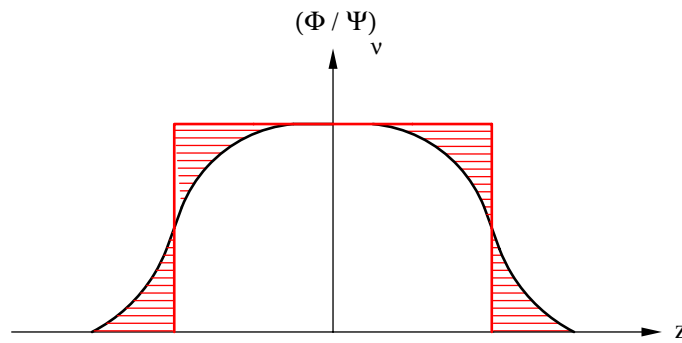


Abbildung 3.7: Die SCOFF-Näherung, schraffierte Flächen sind gleich groß.

In dem für diese Arbeit wichtigen Spezialfall sollen nur Quadrupolfelder (Zähligkeit $\nu = 2$) betrachtet werden. Die paraxiale Differentialgleichung (3.35) läßt sich dann schreiben

$$w'' - G(z)\bar{w} = 0 \quad . \quad (3.109)$$

Dabei wurde die Quadrupolfeldstärke so eingeschränkt, daß ihre Symmetrie Achse im x-Schnitt liegt ($\Phi_{2,s} = 0$ und $\Psi_{2,c} = 0$). Unter diesen Voraussetzungen verschwindet die in (3.44) eingeführte Funktion $T(z) = 0$ und die in Gleichung (3.45) eingeführte Funktion wird

$$G(z) = \bar{G}(z) = \frac{\Lambda}{\Phi_*} (\Phi_{2,c} - v_0 \Psi_{2,s}) \quad (3.110)$$

reell. Im Falle der SCOFF-Näherung läßt sich die Differentialgleichung (3.35) durch trigonometrische und hyperbolische Funktionen lösen. Dabei sei die Größe $g = \sqrt{G(z)}$ als Abkürzung verwendet. Die Fundamentalbahnen lassen sich in Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen \mathbf{x}_0 in der Anfangsebene des betrachteten Bereichs in Matrixschreibweise darstellen. Sie lautet

$$\underline{\mathbf{x}} = \underline{\underline{G}}(g; z) \mathbf{x}_0 \quad (3.111)$$

mit

$$\underline{\underline{G}}(g; z) = \begin{pmatrix} \cosh(gz) & \frac{1}{g} \sinh(gz) & 0 & 0 \\ g \sinh(gz) & \cosh(gz) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos(gz) & \frac{1}{g} \sin(gz) \\ 0 & 0 & -g \sin(gz) & \cos(gz) \end{pmatrix} \quad (3.112)$$

und

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ x' \\ y \\ y' \end{pmatrix} . \quad (3.113)$$

Für die feldfreien Bereiche findet man in Matrizenschreibweise

$$\mathbf{x} = \underline{\underline{L}}(z) \mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} 1 & z & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & z \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{x}_0 . \quad (3.114)$$

Durch einfache Matrizenmultiplikationen lassen sich mit diesem Verfahren beliebige Quadrupolfelder aneinanderreihen. Für die entstehenden Formeln für den Vektor \mathbf{x} lassen sich analytische Ausdrücke angeben, für die sich z.B. die Fokussierungsbedingungen (3.51), (3.52) untersuchen lassen.

Auch die speziellen Bahnen U_π und $U_{\bar{\pi}}$ lassen sich mit Hilfe dieser Matrizen berechnen. Betrachtet man eine asymptotische Abbildung, ist eine Berechnung der Kardinal Elemente des Gesamtsystems möglich. Für die Brennweiten eines Quadrupoles ergeben sich auf diese Weise

$$f_x = \bar{f}_x = -\frac{d}{q \sinh q} \quad (3.115)$$

im x-Schnitt und

$$f_y = \bar{f}_y = \frac{d}{q \sin q} \quad (3.116)$$

im y-Schnitt. Die Länge des Kastenfeldes wird durch d beschrieben. Werden die Ebenen z_a als Anfangsebene und z_e als Endebene des Rechtecks postuliert, lassen sich auch die Lagen der Hauptebenen angeben. Diese lauten

$$z_{H_x} = z_e + d \frac{1 - \cosh q}{q \sinh q} , \quad (3.117)$$

$$z_{\bar{H}_x} = z_a + d \frac{\cosh q - 1}{q \sinh q} , \quad (3.118)$$

$$z_{H_y} = z_e + d \frac{\cos q - 1}{q \sin q} , \quad (3.119)$$

$$z_{\bar{H}_y} = z_a + d \frac{1 - \cos q}{q \sin q} . \quad (3.120)$$

In diesen Gleichungen ist $q = g(z_e)$ d. Mit Hilfe dieser Kardinalelemente läßt sich jede beliebige Abbildung analog zur Lichtoptik geometrisch in Strahlnäherung beschreiben.

Auch die Bildfehler bis einschließlich dritten Ranges lassen sich innerhalb dieser Näherung berechnen. Allerdings werden die Formeln für den dritten Rang, wenn zudem noch Kombinationsfehler berücksichtigt werden, unübersichtlich lang. Die Fehler zweiten Ranges sind komplett beschrieben durch die direkten Farbfehler zweiten Ranges. Sie lassen sich mit Formel (3.77) berechnen. Dabei wird vorläufig der Term mit der unteren Grenze vernachlässigt. Praktischerweise führt man dabei die Abkürzung

$$W^{(2)}(z) = -\frac{1}{2\sqrt{\varepsilon}} \int_{z_0}^z m_E^{(3)} dz = \sum_{\nu=1}^5 \sum_{\mu=\nu}^5 a_\nu a_\mu \kappa C_{\nu\mu\kappa} \quad (3.121)$$

ein. Sind nur Quadrupolfelder vorhanden und keine Rundlinsen lassen sich die $C_{\nu\mu\kappa}$ berechnen durch

$$C_{\nu\mu\kappa} = \frac{U}{4\sqrt{\Phi^*}} \frac{1}{1 + \delta_{\nu\mu}} \int_{z_0}^z \Re \left(-\frac{\Phi_2}{\Phi^*} \bar{w}_\nu \bar{w}_\mu + \Lambda w'_\nu \bar{w}'_\mu \right) dz . \quad (3.122)$$

Nach einer partiellen Integration und ausnutzen der paraxialen Differentialgleichung (3.35) für Quadrupole ergibt sich

$$C_{\nu\mu\kappa} = \frac{U}{4\sqrt{\Phi^*}} \frac{1}{1 + \delta_{\nu\mu}} \Re \left(\Lambda [w'_\nu \bar{w}_\mu]_{z_0}^z - \int_{z_0}^z Q(z) \bar{w}_\nu \bar{w}_\mu dz \right) \quad (3.123)$$

mit

$$Q(z) = \frac{1 + \Lambda^2}{\Phi^*} \Phi_2 + \frac{\Lambda^2}{\Phi^*} i v_0 \Psi_2 \quad (3.124)$$

als eine für die Auswertung in der SCOFF-Näherung sinnvollere Schreibweise. Das letzte verbliebene Integral läßt sich in der SCOFF-Näherung sehr einfach lösen. Man muß dann nur innerhalb der Quadrupolfelder ein Integral über die Fundamentalbahnen aus Gleichung (3.111) lösen. Im Integranden verbleiben somit nur trigonometrische und hyperbolische Funktionen. Die Auswertung erfolgte mit dem Computer Algebra Programm ©Maple.

3.5.2 Vernachlässigung der Ausdehnung des Feldes

Um eine einfache Näherung für die Wirkung der Brechkraft der Multipolkoeffizienten (in diesem Fall von Quadrupolen) zu erhalten, werden diese in diesem Abschnitt als brechende Flächen behandelt. Dabei ist das Ziel, die Fokussierungsbedingungen (3.51) und (3.52)

analytisch auflösen zu können. Diese Gleichungen sind jetzt Polynome in den Multipolkoeffizienten.

In [Rose 1994b] werden Quadrupolfelder innerhalb dieser Näherung in der Form

$$G(z) = -\frac{1}{f_i} \delta(z - z_i) \quad (3.125)$$

beschrieben. Dabei ist f_i die Brennweite und z_i die Lage des i -ten Quadrupoles. Die paraxiale Differentialgleichung (3.35) läßt sich mit dieser Funktion $G(z)$ genau wie in Abschnitt 3.5.1 lösen, wobei dieses Vorgehen auf eine Matrizenschreibweise ähnlich der in diesem erwähnten Abschnitt führt. Die einzige Matrix, die sich dabei ändert, ist die in Gleichung (3.112). Durch eine Entwicklung der trigonometrischen und hyperbolischen Funktionen in eine Taylorreihe, wobei das Argument gegen Null geht, und der Grenzwertbildung $d \rightarrow 0$, läßt sich diese Matrix in diesem Fall schreiben als

$$\underline{\underline{G}}(f_i; z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{f_i} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{f_i} & 1 \end{pmatrix} . \quad (3.126)$$

Damit kann man innerhalb dieser Näherung jede beliebige Quadrupolanordnung berechnen. Die Bestimmung der Kardinal Elemente ist hier trivial, da sie in der Matrizenschreibweise (3.126) implizit verwendet wurde.

Die Farbfehler zweiten Ranges lassen sich mit Hilfe der Gleichung (3.123) ausintegrieren. Dabei muß über die δ -Distribution aus Gleichung (3.125) integriert werden. Diese Auswertung ist elementar. Gleichung (3.125) trennt man nach elektrischen und magnetischen Feldern in der Form

$$G(z) = -\left(\frac{1}{f_e} + \frac{1}{f_m}\right) \delta(z) \quad (3.127)$$

auf. Die Brennweite f_e wird nur durch die elektrischen Quadrupolfelder hervorgerufen und die Brennweite f_m nur durch die magnetischen. Damit läßt sich die Abkürzung $Q(z)$ in Gleichung (3.124) schreiben

$$Q(z) = -\delta(z) \left(\frac{1}{f_e} \frac{1 + \Lambda^2}{\Lambda} + \Lambda \frac{1}{f_m} \right) := -\delta(z) \Lambda b \quad (3.128)$$

mit

$$b = \frac{1}{f_e} \frac{1 + \Lambda^2}{\Lambda^2} + \frac{1}{f_m} . \quad (3.129)$$

Die Abkürzung b gibt die Brechkraft für dünne Quadrupole an. Endgültig läßt sich die Gleichung (3.123) für k dünne Quadrupole schreiben

$$C_{\nu\mu\kappa}(z) = \frac{U}{4\sqrt{\Phi^*}} \frac{\Lambda}{1 + \delta_{\nu\mu}} \Re \left([w'_\nu \bar{w}_\mu]_{z_0}^z \Big|_{z > z_k} + \sum_{i=1}^k b_i \bar{w}_\nu(z_i) \bar{w}_\mu(z_i) \right) . \quad (3.130)$$

Diese Formel lässt sich sehr einfach auswerten und ist besonders in der Endbildebene des zu untersuchenden Systems interessant.

Zusammenfassend eignet sich die Näherung dünner Quadrupole gut dazu einen ersten Überblick über die Abbildungseigenschaften eines Quadrupolsystems zu erlangen. Die Auswertung der auftretenden Gleichungen kann analytisch erfolgen. Möchte man insbesondere die Brennweiten f_i berechnen, müssen Polynome aufgelöst werden.

Kapitel 4

Berechnung von Projektionssystemen

Die Eigenschaften von Projektionssystemen sind nicht nur durch Begriffe wie Vergrößerung, Verzeichnung und dem verwendeten Detektor festgelegt. Wenn ein Energiefilter eingesetzt wird, hat das nachfolgende Projektivsystem mehrere Aufgaben zu erfüllen. In Kap. 2 wurde auf die verschiedenen Übertragungsmöglichkeiten eingegangen. Die zwei wichtigsten sind die elementspezifische Abbildung (ESI für element spezifisch imaging) und die Abbildung des Energie-Verlustspektrums (EELS für electron energie loss spectrum). In diesem Kapitel wurde auch erläutert, warum eine variable Vergrößerung für beide Fälle notwendig ist. Man möchte mehr als nur einen festen Objektbereich und mehr als nur ein festes Energiefenster zur Untersuchung des Objektes nutzen. Während für die elementspezifische Abbildung die notwendigen Bedingungen zur Abbildung schon in Abschnitt 3.3.2 festgelegt wurden, muß für die Abbildung des Energiespektrums beachtet werden, daß das Spektrum nur in einer Richtung (Kap. 2) ausgedehnt ist. In der Richtung senkrecht dazu ist eigentlich keine Bedingung vorzugeben. Günstig ist allerdings einen Punkt der Beugungsebene in einen Strich in der Detektorebene abzubilden. Dadurch wird das Spektrum aufgezogen und zweidimensional abgebildet. Der Detektor wird dann vollständig ausgenutzt, womit Sättigungseffekte unterdrückt werden können. Eine solche Abbildung läßt sich mit Quadrupolen bewerkstelligen [Krivanek 1995].

Wie schon in Kap. 2 festgestellt, sollte ein Projektiv die Abbildungsmöglichkeiten des Elektronenmikroskops nicht beschränken. Normalerweise müssen in Projektiven aufgrund der hohen Vergrößerungen nur die Feldbahnen beachtet werden. Bei Elektronenmikroskopen mit Energiefilter kommt jedoch noch die dispersive Bahn hinzu. Um Hochauflösung zu erreichen, ist vor allem wichtig, den Öffnungsfehler der Objektivlinse zu korrigieren. Im Projektiv wird dagegen nur die Verzeichnung zu beachten sein [Rose 1999]. Vor allem für eine elementspezifische Abbildung und bei der Abbildung des Energieverlustspektrums möchte man einen großen Objektbereich bei großen Energiefenstern untersuchen. Das Problem dabei ist oft, daß bei elementspezifischen Abbildungen das Energiefenster des Filters auf Ionisationskanten gesetzt wird, dessen Intensität im Spektrum sehr gering ist. Dabei müßten hohe Aufnahmezeiten mit allen ihren Nachteilen, oder eben große Objektbereiche genutzt werden. Besser gesagt spielt hier eine möglichst große *Emittanz* bzw. *Akzeptanz* des TEM eine Rolle

[Rose 1999, Krivanek 1995]. Für unterschiedliche abbildende Energiefilter innerhalb der Mikroskopsäule ist eine ideale Akzeptanz für eine optimale Zwischenvergrößerung, bei der die Größe des Beugungsbildes gleich der gewählten Größe der Schlitzbreite des Energiefensters in der Energieselektionsebene ist, von [Uhlemann 1996] berechnet worden. In [Rose 1995] wird die Akzeptanz als eine Abwandlung des Phasenraumvolumens definiert. In Folge der Spezialisierung einer Richtung als optischer Achse des Systems, lassen sich die Neigungen der Bahnen anstatt des Impulses verwenden. Anstelle des Phasenraumes tritt dann der Spurenraum. Aufgrund der Anwesenheit des Energiefilters und der dispersiven Bahn muß diesem modifizierten Phasenraum noch eine Abweichung in der z -Richtung des Impulses hinzugefügt werden. Dies soll hier als eine Abweichung von der Sollenergie, bzw. durch die Größe κ , aufgefaßt werden. Sehr verkürzt gesagt läßt sich unter bestimmten Anfangsbedingungen [Rose 1995] diese Akzeptanz als Produkt der Parameter a_i und κ auffassen. Im Sinne der oben begründeten großen Objektbereiche und großen Energiefenster muß für ein Projektivsystem als letztem elektronenoptischem Element eine mindest Akzeptanz gefordert werden, um die Emittanz der vorhergehenden Elemente nicht zu beschränken. Die Akzeptanz wird im Projektivsystem durch den Bohrungsdurchmesser der verwendeten Polschuhe begrenzt, da keine Blenden für Apertur und Bildfeld vorgesehen sind. In den nachfolgenden Abschnitten wird das Konzept verfolgt, diese Akzeptanz zu maximieren. Nebenbei sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, daß der Bohrungsdurchmesser der verwendeten Elemente beliebig groß gewählt werden kann. Dabei ist als physikalische Grenze allerdings eine besondere Kühlung der Polschuhe und im Besonderen die Sättigung der Polschuhe zu berücksichtigen, um die gleiche Multipolfeldstärke auf der Achse einzustellen. Daher ist es unter **gleichen** Bedingungen sinnvoll die Akzeptanz zu maximieren.

Wie in Kap. 2 dargestellt, ist sowohl die elementspezifische Abbildung als auch das Übertragen des Energie-Verlustspektrums anisotrop in den Richtungen parallel und senkrecht zur Lage des Schnittes, in der das Energiespektrum vorliegt. In [Rose 1995] wird außerdem eine *zweidimensionale Akzeptanz* eingeführt. Diese ist nur legitim, wenn die teilchenoptische Anordnung paraxial in zwei senkrecht zueinander angeordnete Schnitte entkoppelt werden kann. In diesem Fall werden Quadrupole verwendet, die diese Bedingung automatisch erfüllen. Die Akzeptanz kann demnach entkoppelt in zwei orthogonalen Schnitten maximiert werden. Für Projektivsysteme sollten demnach in der Richtung der Dispersion vor allem die Feldbahn x_γ und die dispersive Bahn x_κ berücksichtigt werden, während im orthogonalen Schnitt im wesentlichen nur die Feldbahn y_δ eine Rolle spielt. Diese Art der Maximierung der Akzeptanz ist demnach optimal für Elektronenmikroskope mit Energiefilter angepaßt. Um es noch einmal zu betonen: auch die elementspezifische Abbildung, die eigentlich eine runde Abbildung ist, läßt sich auf diese Weise mit Hilfe von Quadrupolfeldern optimieren.

Die Optimierung der Akzeptanz erfolgt zunächst in paraxialer Näherung, danach sind die Bildfehler zu berücksichtigen. Um zuerst die paraxiale Näherung zu untersuchen, ist es wichtig ein Verfahren anzugeben, mit dem die Gesamtheit aller Lösungen effizient beurteilt werden kann. Dazu bieten sich die Näherungsverfahren aus Abschnitt 3.5 an, wobei in der Reihenfolge zuerst dünne Quadrupole und dann ausgedehnte Quadrupolfelder angenommen werden. Die Lösung der Gleichungen für die dünnen Quadrupole erfolgt weitgehend analy-

tisch. Diese Lösungen können dann als Startwerte zur numerischen Lösung der Gleichungen für ausgedehnte Felder herangezogen werden. Maximale Akzeptanz bedeutet in diesen Rechnungen eine Minimierung der Auslenkungen und Neigungen der Fundamentalbahnen, da in diesem Fall die Parameter a_i und κ die größten Werte annehmen dürfen. Nachdem in dieser Lösungsmenge die maximale Akzeptanz selektiert wurde, sind die minimalen Bildfehler herauszusuchen. Auch dies dient zur Maximierung der Akzeptanz. Wie schon geschildert, ist auch die Berechnung der Bildfehler im Rahmen der SCOFF-Näherung analytisch möglich. Damit ist ein Verfahren gefunden, das eine schnelle und effiziente Berechnung und Klassifizierung aller erforderlichen Größen für sehr viele Systeme ermöglicht und einen guten Überblick über die Menge aller möglichen Projektivsysteme liefert.

Im folgenden werden Quadrupolsysteme mit einem Hauptschnitt der Brechkraft des Feldes im xz -Schnitt untersucht. In einem ersten Schritt werden in diesem Kapitel Projektionssysteme mit einer Symmetrie der Felder bezüglich einer Mittelebene berechnet und deren Vorteile und Nachteile für die hier gewünschten Zwecke angegeben.

Danach wird die Symmetrie bezüglich einer Mittelebene aufgegeben und allgemeine Quadrupolsysteme behandelt. Dabei wird im wesentlichen auf die Lösungsmethode eingegangen. Die einzige notwendige Einschränkung, die dabei vorgenommen wird, sind die Festlegungen der Abbildungsbedingungen in der Detektorebene. Dafür werden verschiedene Fälle diskutiert.

Für eine vollständige Beurteilung des Systems müssen die Bildfehler berechnet werden. Dabei werden Korrekturmöglichkeiten diskutiert und Kriterien zur Beurteilung vorgestellt.

Nach diesen Schritten sind alle Voraussetzungen zur Klassifizierung eines optimalen Projektivsystems im Rahmen der SCOFF-Näherung gegeben. Im folgenden Abschnitt werden die Kriterien zur Auswahl eines Projektionssystems vorgestellt.

Da die bis dahin verwendeten Näherungsfelder nicht die Laplacegleichung erfüllen, werden abschließend die Felder aus Kap. 3.4 zur Berechnung herangezogen. Dieses Kapitel dient der Verifizierung der bisherigen Rechnungen.

Im letzten Abschnitt dieses Kapitels werden dann die Ergebnisse zusammengefaßt. Im Sinne der Anforderungen eines Projektivs können die wichtigsten berechneten Größen als Funktion der Vergrößerung angegeben werden.

4.1 Symmetrische Projektionssysteme

Abbildende Quadrupolsysteme mit Mittelebenensymmetrie lassen sich besonders einfach berechnen. Prinzipiell können zwei verschiedene Symmetrien für die Quadrupolfelder bezüglich der Mittelebene angenommen werden.

Zuerst soll der Fall von punktsymmetrischen Feldern bezüglich der Mittelebene diskutiert werden, der nur mit einer geraden Anzahl von Quadrupolen realisiert werden kann. Die pa-

axiale Differentialgleichung (3.109) läßt sich, wenn nur Quadrupole berücksichtigt werden, im xz -Schnitt und im yz -Schnitt schreiben als

$$x'' - G(z) x = 0 \quad (4.1)$$

$$y'' + G(z) y = 0 \quad (4.2)$$

Bei punktsymmetrischen Feldern ist anhand des Vorzeichenwechsels in diesen Gleichungen zu erkennen, daß die erste Hälfte des Systems bis zur Mittelebene in die zweite Hälfte des Systems durch eine Drehung um 90° und einer Spiegelung an der Symmetrieebene übergeht. Demnach ist eine Lösung der Differentialgleichung (4.1) im xz -Schnitt in der ersten Hälfte nach der Drehung und Spiegelung eine Lösung der Differentialgleichung (4.2) im yz -Schnitt in der zweiten Hälfte. Die gleiche Argumentation gilt auch für eine zweite Bahn im yz -Schnitt der ersten Hälfte, die demzufolge nach der Drehung und Spiegelung eine Lösung von (4.1) in der zweiten Hälfte ist. Durch die Geometrietransformationen bleiben die Auslenkungen der Bahnen und deren Steigungen gleich. Um das komplette System am Ende wieder in einen runden Strahlengang zu überführen, muß demnach nur eine Bedingung erfüllt werden. Die Auslenkung der ersten beschriebenen Bahn im yz -Schnitt muß gleich der der zweiten beschriebenen Bahn im xz -Schnitt am Ende des Systems sein. Waren beide Bahnen zu Beginn des Systems gleich, ist der Strahlengang hinter dem System wieder rund. Durch die Annahme von punktsymmetrischen Feldern bezüglich einer Mittelebene lassen sich die zu stellenden Bedingungen von zwei auf eine reduzieren. Dies wird in den weiteren Überlegungen eine große Rolle spielen.

Bei Systemen mit achsensymmetrischen Feldern gilt diese Überlegung nicht. An Stelle dessen berechnet man am einfachsten symmetrische und antisymmetrische Bahnen bezüglich der Mittelebene. Die kleinste Anzahl der verwendeten Quadrupole für ein System ist in diesem Fall ungerade, vergleicht man die Anzahl der freien Parameter.

Eine Aufgabe eines Projektivs ist, eine runde Abbildung mit variabler Vergrößerung und fester Ausgangs- und Endbildebene zu erzeugen. Zunächst wird in dieser Arbeit das Ziel verfolgt, mit Quadrupolsystemen die gleichen Eigenschaften wie die einer Rundlinse einzustellen. Die Abbildung soll am Ende des Systems wieder rund sein und eine variable Gesamtbrennweite besitzen. Da dies für die erwähnten Anforderungen eines Projektivs nicht ausreicht, wird weiterhin untersucht, ob eine variable Vergrößerung in festen Bildebenen möglich ist. Mit zwei Rundlinsen bzw. zwei Quadrupolanordnungen, die die Wirkung einer Rundlinse haben, gelingt das Vorhaben auf jeden Fall. Um die Anzahl der erforderlichen Elemente zu minimieren wird an dieser Stelle die Frage gestellt, ob dies auch mit nur einer symmetrischen Quadrupolanordnung erreichbar ist.

Als ein erstes Beispiel wird eine Anordnung aus vier Quadrupolen angenommen. Werden die Felder punktsymmetrisch vorausgesetzt, gilt nach obigen Ausführungen, daß nur eine Bedingung für runde Systeme notwendig ist. Da zwei Quadrupolstärken zur Verfügung stehen, läßt sich demnach eine für eine variable Brennweite verwenden. Das Quadruplett wirkt wie eine Rundlinse, eine variable Vergrößerung in festen Bildebenen wird aber mangels weiterer Parameter nicht möglich sein.

Um eine solche Anordnung zu berechnen ist, wie in der Einleitung zu diesem Kapitel erwähnt, zuerst die SCOFF-Näherung einzusetzen. In dem Artikel [Kawakatsu 1968] wurde eine solche Berechnung und ein experimentelles Design durchgeführt. Der Effekt der Geometrieparameter einer solchen Anordnung wurde ausführlich in [Dymnikov 1965a] untersucht. In diesem Artikel wird allerdings die Quadrupolfeldstärke $\Phi_2(z)$ alternierend für aufeinanderfolgende Quadrupole gewählt. Das allgemeinere System von [Kawakatsu 1968] nimmt diese Einschränkung nicht vor. Die Symmetrieebene dieser vier Quadrupole liegt in der Mitte zwischen dem zweiten und dritten Element. Die Feldstärken der Quadrupole werden punktsymmetrisch zu dieser Ebene gewählt. Für eine übersichtliche Berechnung lassen sich die Matrizen aus Kap. 3.5.1 heranziehen. Die Abkürzungen $g_i, i = 1, \dots, 4$ für jeden Quadrupol, werden dabei reell bzw. auf der imaginären Achse gewählt, je nachdem ob das Quadrupolfeld im xz -Schnitt defokussierend oder fokussierend wirkt. Der Betrag $|g_i|$ des ersten und vierten bzw. des zweiten und dritten Quadrupoles ist gleich, so daß nur die ersten beiden Quadrupolstärken als Parameter verbleiben. Die Übertragungsmatrix dieses Quadrupletts lautet

$$\underline{\underline{M}} = \underline{\underline{G}}(g_4, d) \cdot \underline{\underline{L}}(l_1) \cdot \underline{\underline{G}}(g_3, d) \cdot \underline{\underline{L}}(l_2) \cdot \underline{\underline{G}}(g_2, d) \cdot \underline{\underline{L}}(l_1) \cdot \underline{\underline{G}}(g_1, d) \quad . \quad (4.3)$$

Alle Quadrupole haben in SCOFF-Näherung die gleiche Länge d . Die Abstände zwischen den Quadrupolen sind die Längen l_i . Multipliziert man diese Matrix aus, läßt sich feststellen, daß die Matrixelemente

$$\begin{aligned} M_{11} &= M_{44} & M_{12} &= M_{34} \\ M_{22} &= M_{33} & M_{21} &= M_{43} \end{aligned} \quad (4.4)$$

übereinstimmen, was eine unmittelbare Folge der Zweischnittsymmetrie der Felder und der Punktsymmetrie bzgl. der Mittelebene der Anordnung ist. Um eine stigmatische Abbildung analog zu einer Rundlinse zu erhalten, muß nur noch

$$M_{11} = M_{33} \quad \text{oder} \quad M_{22} = M_{44} \quad (4.5)$$

gefordert werden [Kawakatsu 1968]. Mit der zweiten Quadrupolstärke kann die Brennweite variiert werden. Da sich aber dabei auch die Lagen der Hauptebenen ändern, ist es mit diesem System nicht möglich eine variable Vergrößerung in einer festen Endbildebene einzustellen. Dazu müßte eine weitere Bedingung gefordert werden, die sich nur für eine Brennweite einstellen läßt. Für ein Projektivsystem kann man auch auf eine feste Endbildebene verzichten und für die Lage des Detektors eine variable Vergrößerung fordern. Dabei wird allerdings ein Fokussierungsfehler erster Ordnung in Kauf genommen, der unterhalb der Auflösungsgrenze des Detektors bleiben sollte. In diesem Fall ist dann natürlich der Bereich, in der die Vergrößerung variiert werden kann, eingeschränkt. In bisherigen Projektiven werden aus diesem Grund mindestens zwei Rundlinsen verwendet. Für ein analoges System aus Quadrupletts mit Quadrupolen müssen dafür mindestens acht Quadrupolelemente mit mindestens vier Stromquellen verwendet werden. Alleine aus Gründen der Länge, die ein solches System aufweisen würde, sollte dieses Vorgehen vermieden werden.

Auch die Idee mehr als vier Quadrupole mit Symmetrieebene zu verwenden, scheitert aus diesen Gründen. In dieser Arbeit wurde dazu ein System mit fünf Quadrupolen und achsensymmetrischen Feldern bezüglich der Mittelebene untersucht. Für eine Berechnung eines solchen Systems halbiert man es in der Symmetrieebene [Rose 1994b]. Die Quadrupolstärke q_3 , die in der Symmetrieebene liegt, wird aus diesen Gründen ebenfalls halbiert. Die Berechnung der Bahnen erfolgt bis zu dieser Mittelebene, wobei sie sich durch die verwendete Symmetrie leicht fortsetzen lassen. Wiederum aus Gründen der Symmetrie sind zur Fokussierung des Systems symmetrische und punktsymmetrische Bahnen zu verwenden. Demnach sind die Fokussierungsbedingungen Bahnen mit Auslenkung bzw. Steigung in der Symmetrieebene gleich Null. Die Transfermatrix vom ersten Quadrupol bis zur Mittelebene z_M berechnet sich zu

$$\underline{\underline{M}}_- = \underline{\underline{G}}(f_3, z_3) \cdot \underline{\underline{L}}(l_2) \cdot \underline{\underline{G}}(f_2, z_2) \cdot \underline{\underline{L}}(l_1) \cdot \underline{\underline{G}}(f_1, z_1) \quad , \quad (4.6)$$

wenn dabei die Matrizen für dünne Quadrupole aus Kap. 3.5.2 benutzt werden. Der Transfer von der Mittelebene bis zum letzten Quadrupol läßt sich durch

$$\underline{\underline{M}}_+ = \underline{\underline{G}}(f_1, z_5) \cdot \underline{\underline{L}}(l_1) \cdot \underline{\underline{G}}(f_2, z_4) \cdot \underline{\underline{L}}(l_2) \cdot \underline{\underline{G}}(f_3, z_3) \quad , \quad (4.7)$$

für ein Quadrupol–Quintuplett beschreiben. Die gesamten Transfereigenschaften der Anordnung werden durch die Matrix

$$\underline{\underline{M}} = \underline{\underline{M}}_+ \cdot \underline{\underline{M}}_- \quad (4.8)$$

angegeben. Für diese Matrix lassen sich leider nicht die einfachen Beziehungen (4.4) feststellen. Die einzige Ausnahme ist eine punktsymmetrische Anordnung z. B. der Gestalt

$$-f_1, f_2, -f_3, f_3, -f_2, f_1 \quad . \quad (4.9)$$

Die Vorzeichen legen dabei den Schnitt fest, in denen der Quadrupol defokussierend wirkt. Da der Quadrupol mit der Brennweite f_3 ein einziges Element darstellen soll, ist der Vorzeichenwechsel mit einem Quintuplett nicht realisierbar.

Ein anderer Weg diese Anordnung zu charakterisieren, besteht in der Berechnung der Kardinal Elemente. Am einfachsten geschieht dies durch die Berechnung der symmetrischen und punktsymmetrischen Bahnen. Diese lassen sich in der Symmetrieebene z_M im symmetrischen Fall durch

$$\mathbf{x}_M = \begin{pmatrix} x_\sigma \\ 0 \\ y_\sigma \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

und im punktsymmetrischen Fall durch

$$\mathbf{x}_M = \begin{pmatrix} 0 \\ x'_\sigma \\ 0 \\ y'_\sigma \end{pmatrix} . \quad (4.11)$$

festlegen. Da beide betrachteten Fälle die geforderte Symmetrie erfüllen und beide linear unabhängige Lösungen der Differentialgleichung (3.35) sind, geben sie die Bedingungen für das Quintuplettsystem an. Den Transfer von der Ebene z_1 des ersten Quadrupoles in die Symmetrieebene z_M läßt sich durch

$$\mathbf{x}_M = \underline{\underline{M_-}} \mathbf{x}_1 \quad (4.12)$$

beschreiben. Eine einfache Matrixmultiplikation ergibt die Bedingungsgleichungen für symmetrische

$$\begin{aligned} M_{-2,1} x_1 + M_{-2,2} x'_1 &= 0 \\ M_{-4,3} y_1 + M_{-4,4} y'_1 &= 0 \end{aligned} \quad (4.13)$$

und für antisymmetrische

$$\begin{aligned} M_{-1,1} x_1 + M_{-1,2} x'_1 &= 0 \\ M_{-3,3} y_1 + M_{-3,4} y'_1 &= 0 \end{aligned} \quad (4.14)$$

Bahnen. In der Ebene z_1 wird das abbildende System als „rund“ vorausgesetzt, wobei dies $x_1 = y_1$ und $x'_1 = y'_1$ für alle x_1, x'_1 bedeuten soll. Da die Gleichungen (4.13) und (4.14) für beliebige Bahnen mit den Anfangsbedingungen x_1 und x'_1 gelten sollen, legen die Determinanten

$$\begin{aligned} M_{-4,3} M_{-2,2} - M_{-4,4} M_{-2,1} &= 0 \\ M_{-3,3} M_{-1,2} - M_{-3,4} M_{-1,1} &= 0 \end{aligned} \quad (4.15)$$

deren Lösungen fest. Da in der Ebene z_1 die Annahme eines runden Systems getroffen wurde, gibt die Symmetrie des Systems auch wieder ein rundes System in der Ebene des letzten Quadrupoles z_5 vor. Im Unterschied zu dem zuvor betrachteten System aus vier Quadrupolen, in dem nur eine Gleichung (4.5) gelöst werden muß, müssen in diesem Fall allerdings die zwei Gleichungen (4.15) erfüllt werden. Damit besitzt ein Quadrupol–Quintuplett hinsichtlich des analytischen Aufwands bei der Berechnung und der experimentellen Realisierung keine Vorteile gegenüber einem symmetrischen Quadrupol–Quadruplett. Durch den zusätzlichen Quadrupol werden keine weiteren freien Parameter zur Verfügung gestellt.

Die Gleichung (4.9) läßt sich mit sechs Quadrupolen realisieren. Für ein solches Quadrupol–Sextuplett lassen sich die gleichen Symmetriebedingungen für die Quadrupolstärken anwenden wie für ein Quadruplett. Des weiteren sind auch die Gleichungen (4.4) wieder erfüllt, so daß wiederum nur eine Bedingung (4.5) an das System zu stellen ist. Mit Hilfe der Matrizen aus Kapitel (3.5.2) läßt sich die Transfermatrix eines Sextupletts ausrechnen zu

$$\underline{\underline{M}} = \underline{\underline{G}}(f_1, z_6) \cdot \underline{\underline{L}}(l_1) \cdot \underline{\underline{G}}(-f_2, z_5) \cdot \underline{\underline{L}}(l_2) \cdot \underline{\underline{G}}(f_3, z_4) \cdot \underline{\underline{L}}(l_3) \cdot \underline{\underline{G}}(-f_3, z_3) \cdot \underline{\underline{L}}(l_2) \cdot \underline{\underline{G}}(f_2, z_2) \cdot \underline{\underline{L}}(l_1) \cdot \underline{\underline{G}}(-f_1, z_1) , \quad (4.16)$$

wobei hier die Vorzeichen der Brennweiten f_i die gewählte Punktsymmetrie der Quadrupolbrechkräfte angibt. Wie bereits aufgezeigt, reicht es in diesem Fall aus, die Bedingung (4.5)

für ein erster Ordnung stigmatisches verzeichnungsfreies System zu fordern. Für ein Projektivsystem mit variabler Vergrößerung und fester Lage der Ausgangs- und Endbildebene verlangt man jedoch mehr. Die Transfermatrix eines solchen Systems lautet

$$\underline{\underline{M}}_{ges} = \underline{\underline{L}}(b) \cdot \underline{\underline{M}} \cdot \underline{\underline{L}}(g) \quad , \quad (4.17)$$

wobei b den Abstand des letzten Quadrupoles zur Endbildebene und g den Abstand der Ausgangsebene zum ersten Quadrupol festlegt. Für eine variable Vergrößerung bei einer erster Ordnung stigmatischen verzeichnungsfreien Abbildung sind folgende Bedingungen zu fordern:

$$\begin{aligned} M_{ges1,1} &= V \\ M_{ges1,2} &= 0 \end{aligned} \quad (4.18)$$

Dabei bezeichnet V die Vergrößerung. In den folgenden Rechnungen hat es sich als günstig erwiesen, mit den Brechkraften $d_i = \frac{1}{f_i}$ zu rechnen, denn kleine Brechkraften bedeuten kleine Feldstärken der Quadrupole. Die zu lösenden Polynome, die nach den Brechkraften aufgelöst werden sollen, sind dadurch im physikalisch interessanten Bereich numerisch stabiler.

Die Gleichungen (4.5) und (4.18) ergeben ein Gleichungssystem, daß sich nach elementaren Umformungen in die Form

$$d_1 = -\frac{d_2 d_3^2 + d_3 - 3 d_2}{2 d_3 d_2 - 3 d_2^2 - 4 d_3^2 + d_3^2 d_2^2 + 5} \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} 0 = & 38 d_3^2 d_2^2 - 18 b d_2^2 - 4 g b d_3^4 d_2^2 - 6 g b d_3^2 d_2^4 + 18 g b d_3^2 d_2^2 - 12 g b d_3 d_2^3 \\ & + 4 g b d_3^3 d_2^3 + 4 g d_2^2 d_3^3 + 28 g d_2^2 d_3^2 + 9 b d_2^4 - 16 d_3^3 d_2 - 14 b d_3^2 \\ & - 12 b d_2^3 d_3 - 8 d_2^2 d_3^4 + 8 b d_3^4 - 6 d_2^4 d_3^2 + 4 d_2^3 d_3^3 - 12 g d_3^3 d_2 + 9 d_2^4 \\ & + 4 g b d_3^4 - 8 g b d_3^3 d_2 - 12 b d_3^3 d_2 + 28 b d_3^2 d_2^2 + d_2^4 d_3^4 b + d_2^4 d_3^4 g \\ & - 6 b d_3^4 d_2^2 + 4 b d_3^3 d_2^3 - 6 g d_2^4 d_3^2 - 6 g d_2^2 d_3^4 - 18 g d_2^2 + 12 g d_3 d_2 \\ & - 12 g d_2^3 d_3 + 8 g d_3^4 - 14 g d_3^2 + 9 g d_2^4 - 6 b d_3^2 d_2^4 + d_2^4 d_3^4 g b + 9 g b d_2^4 \\ & + 16 d_3^4 + 20 d_3 d_2 - 30 d_2^2 - 40 d_3^2 + d_2^4 d_3^4 - 12 d_2^3 d_3 - 6 g b d_2^2 \\ & + 4 g b d_3 d_2 + 5 b + 12 b d_3 d_2 - 4 g b d_3^2 + 5 g + 25 \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} 0 = & -28 d_3^2 d_2^2 + 6 b d_2^2 - 9 b d_2^4 + 12 d_3^3 d_2 + 4 b d_3^2 + 12 b d_2^3 d_3 + 6 d_2^2 d_3^4 \\ & - 4 b d_3^4 + 6 d_2^4 d_3^2 - 4 d_2^3 d_3^3 - 9 d_2^4 + 8 b d_3^3 d_2 - 18 b d_3^2 d_2^2 - d_2^4 d_3^4 b \\ & + 4 b d_3^4 d_2^2 - 4 b d_3^3 d_2^3 + 6 b d_3^2 d_2^4 - 4 V d_3^2 - 8 d_3^4 + 5 V - 12 d_3 d_2 \\ & + 18 d_2^2 + 14 d_3^2 - d_2^4 d_3^4 - 3 d_2^2 V + 12 d_2^3 d_3 - 4 b d_3 d_2 + 2 d_3 d_2 V \\ & + d_3^2 d_2^2 V - 5 \end{aligned} \quad (4.21)$$

bringen läßt. Diese Gleichungen wurden mit Hilfe eines Computer Algebra Programmes (©Maple) erstellt. Als weitere Annahmen wurde dabei $l_1 = l_2 = l_3 = l$ eingeführt, was

die Geometrie des Systems und dessen analytische Berechnung deutlich vereinfacht. Änderungen an der Geometrie der Anordnung widerlegen die hier getroffenen Aussagen nicht, solange die Punktsymmetrie beibehalten wird. Alle auftretenden Längen wurden dabei auf l normiert. Unter Berücksichtigung der auftretenden Pole bei dieser Umformung, lassen sich die Ergebnisse in Form von Graphen als Funktion von d_2 und d_3 betrachten.

Für eine Vergrößerung $V = -1$ läßt sich der Lösungsraum durch den Graph der Funktionen von (4.20) und (4.21) in **Abb. 4.1** darstellen. Die innere geschlossene Kurve ist eine Überlagerung beider Gleichungen und gibt den günstigsten Lösungsraum an. Ein Beispiel für diese innere Kurve sind die Fundamentalbahnen aus **Abb. 4.2**. In diesem Fall ist die Brechkraft d_3 fast Null. Die Startwerte zur Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems wurden der **Abb. 4.1** entnommen. Im Auge behalten werden sollte dabei jedoch Gleichung (4.19), die in **Abb. 4.3** als Funktion der Brechkräfte d_2 und d_3 dargestellt wurde.

Bei anderen Vergrößerungen verändert sich vor allem der Lösungsraum der Gleichungen (4.20) und (4.21). Als Beispiel dafür dient die Abbildung **Abb. 4.4** für eine Vergrößerung $V = -10$. Wie zu erkennen, ist jetzt die innere geschlossene Kurve keine Lösung mehr. Lösungen liegen z. B. etwa bei $d_2 = \pm 0.8$ und $d_3 = \pm 1.2$. Die Gleichung (4.19) ist nach Konstruktion weder von der Vergrößerung V noch von g und b abhängig und ändert sich damit in **Abb. 4.3** nicht. Demnach läßt sich aus **Abb. 4.3** für die beschriebenen Lösungen ablesen, daß die Brechkraft d_1 sehr groß werden muß. Konkret erhält man die Werte $d_1 \approx 767$ für $V = -10$ und $d_1 \approx 5600$ für $V = -100$. Diese Brechkräfte erfordern viel zu große Feldstärken und sind somit nicht realisierbar.

Die **Abb. 4.4** weist einen weiteren vielversprechenden Lösungsweig bei etwa $d_2 \approx \pm 2$ und $d_3 \approx \pm 2$ auf. Die Fundamentalbahnen für eine Vergrößerung von $V = -10$ zeigt **Abb. 4.5**. Bei einer ausführlichen Betrachtung zeigt sich allerdings, daß dieser Lösungsweig in der Nähe eines Pols des gelösten Gleichungssystems liegt. Für höhere Vergrößerungen laufen die Lösungen von größeren Werten von d_3 zu kleineren Brechkräften entlang dieser Kurve in die Richtung der Lage der Kurve des Pols. Vor allem bei großen Vergrößerungen, z. B. $V = -100$ wird dadurch diese Lösung extrem instabil. Den Lösungsraum für diese Vergrößerung ist in **Abb. 4.6** dargestellt. Ein Zoom-Projektiv ist mit einer solchen Anordnung nicht realisierbar, da eine extrem hohe Rechengenauigkeit zur Fokussierung der Bahnen benötigt wird. Experimentell bedeutet dies eine zu hohe Anforderung an die Stabilität der Quellen und die Justierung des Systems.

Das sich mit symmetrischen Anordnungen von Elementen für vergrößernde Systeme offenbar nur eine 1 : 1-Abbildung sinnvoll erzeugen läßt, hat ihre Ursache darin, daß sie eben für solche Systeme entworfen wurden und auch die Bahnen diese Symmetrie aufweisen. Für eine Anwendung mit einer Vergrößerung ungleich eins haben sie den prinzipiellen Nachteil, keine asymmetrischen Lagen der Haupt- und Brennebenen zuzulassen. Des weiteren bleibt kein weiterer freier Parameter übrig, um die Akzeptanz zu optimieren, respektive einen Bildfehler zu korrigieren. Dies wiegt die Vorteile einer symmetrischen Anordnung auf. Man kann mit ihr die Anzahl der erforderlichen Elemente und der erforderlichen Ströme minimieren und mit Hilfe einer 1 : 1-Abbildung gezielt Bildfehler korrigieren (siehe z. B. [Rose 1970])

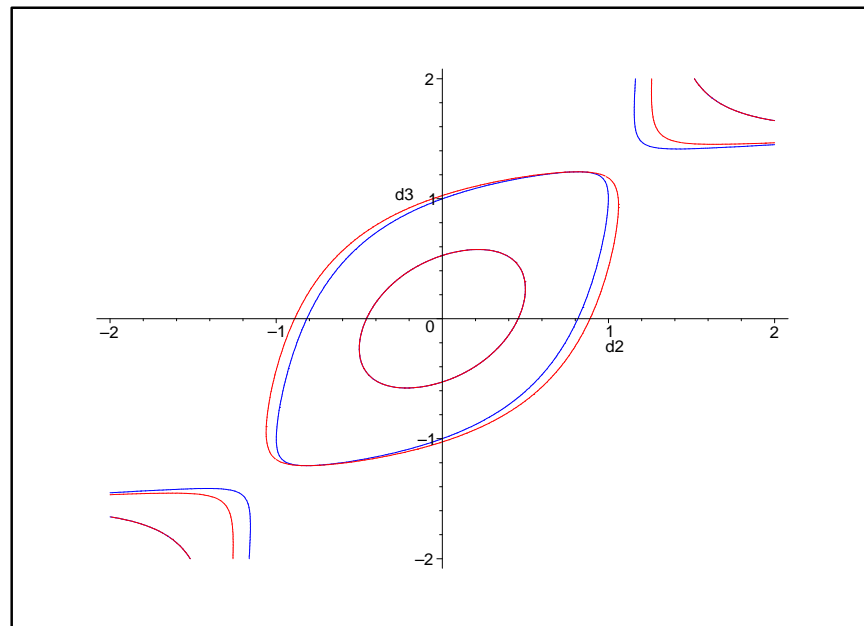


Abbildung 4.1: Der Lösungsraum eines abbildenden Sextupletts.

— Gleichung (4.20), — Gleichung (4.21).

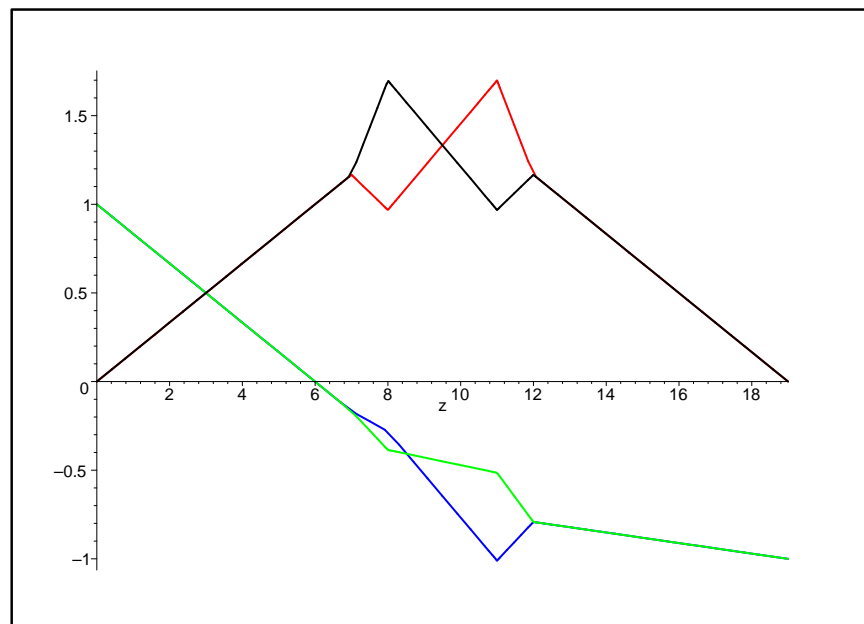


Abbildung 4.2: Die Fundamentalbahnen eines abbildenden Sextupletts mit Vergrößerung $V = -1$.

— axiale Bahn im xz -Schnitt, — Feldbahn im xz -Schnitt,
 — axiale Bahn im yz -Schnitt, — Feldbahn im yz -Schnitt.

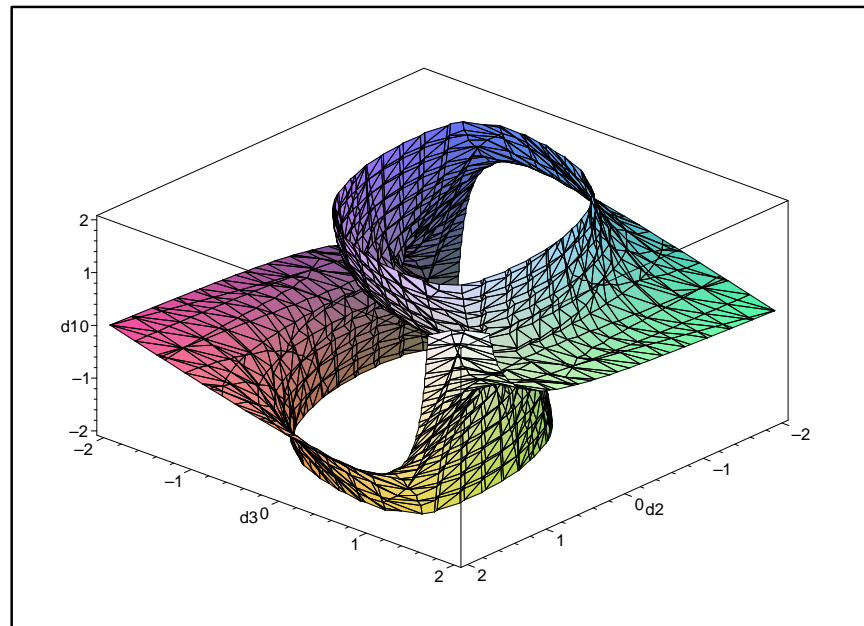


Abbildung 4.3: Die Brechkraft des ersten Quadrupoles eines abbildenden Sextupletts für eine erster Ordnung stigmatische verzeichnungsfreie Abbildung unabhängig von der gewählten Vergrößerung. Gleichung (4.19).

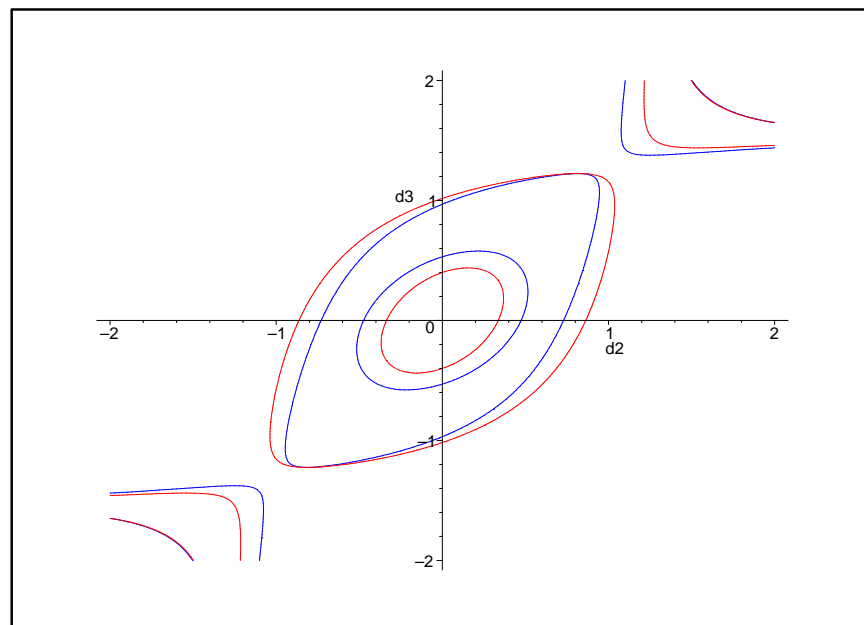


Abbildung 4.4: Der Lösungsraum eines Sextupletts für die Vergrößerung $V = -10$.
— Gleichung (4.20), — Gleichung (4.21).

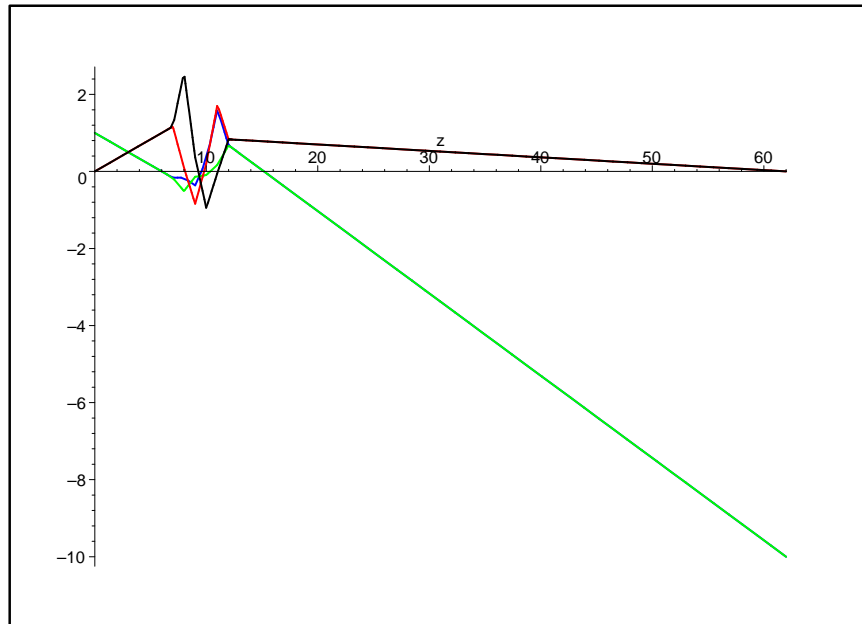


Abbildung 4.5: Die Fundamentalbahnen eines abbildenden Sextupletts mit Vergrößerung $V = -10$.

— axiale Bahn im xz-Schnitt, — Feldbahn im xz-Schnitt,
— axiale Bahn im yz-Schnitt, — Feldbahn im yz-Schnitt.

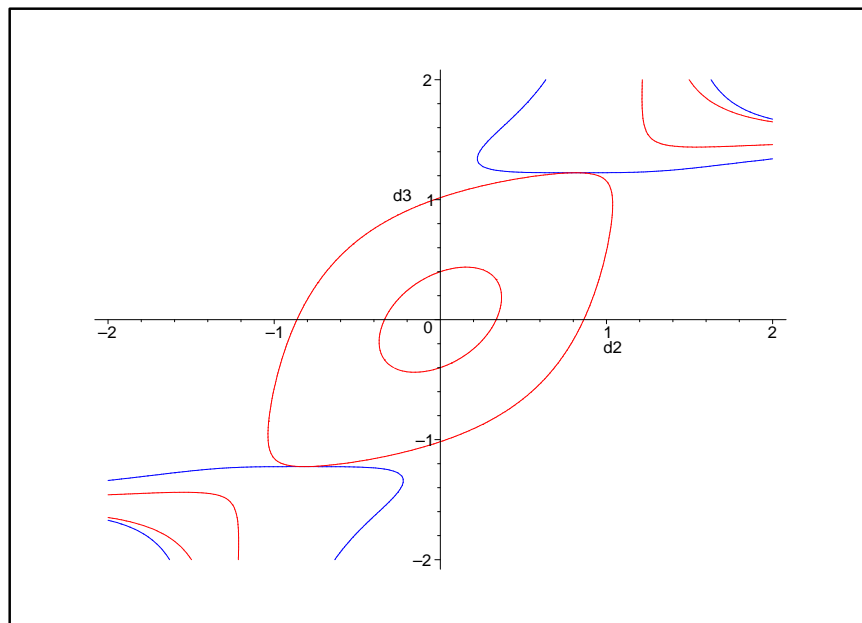


Abbildung 4.6: Der Lösungsraum eines Sextupletts für die Vergrößerung $V = -100$.

— Gleichung (4.20), — Gleichung (4.21).

und [Rose 1971]). Da in einem Projektiv mit einer Vergrößerung ungleich eins, alle Fehler die von κ und den Feldbahnen abhängen eine Rolle spielen, nützt dieser Vorteil bei einer 1 : 1–Abbildung nichts. Eine Abbildung mit variabler Vergrößerung in eine feste Endbildebene läßt sich mit symmetrischen Systemen erst für eine zweifache Quadrupol–Quadruplett Anordnung erzeugen, wie hier gezeigt wurde. Selbst bei einer solchen Wahl gibt es keinen weiteren Parameter, um gezielt die Akzeptanz bei jeder möglichen Vergrößerung zu beeinflussen. In Abb. 4.2 ist zu erkennen, daß die Akzeptanz bei 1 : 1–Abbildung in symmetrischen Systemen optimal ist. Für Vergrößerungen größer eins sollte deshalb innerhalb der Quadrupole ein *quasisymmetrischer* Strahlengang eingestellt werden. Außerhalb der verwendeten Elemente sind die Verhältnisse durch $V \neq 1$ naturgemäß asymmetrisch. Nach diesen Vorgaben sollte ein Projektiv optimiert werden. In den nachfolgenden Abschnitten wird dies beschrieben. Dabei wird gezeigt, daß sich für asymmetrische Vergrößerungssysteme die Anzahl der Quadrupole reduzieren läßt.

4.2 Asymmetrische Projektionssysteme

In Kap. 2 wurde auf die verschiedenen Abbildungsmöglichkeiten bei Verwendung eines abbildenden Energiefilters hingewiesen. In diesem Kapitel wird auf die Gauß’sche Dioptrik der elementspezifischen Abbildung (ESI) und der Abbildung des Energieverlustspektrums eingegangen. Das erstgenannte Verfahren ist als Weiterführung des vorigen Abschnitts 4.1 zu verstehen. Genau wie in Kap. 4.1 ist eine runde Abbildung gefordert. Allerdings brauchen die Steigungen der Feldbahnen in der Endbildebene nicht übereinzustimmen. Die Forderungen, die in diesem Fall an das System gestellt werden müssen, sind eine in erster Ordnung stigmatische, verzeichnungsfreie Abbildung. In die Sprache der Fundamentalbahnen übersetzt heißt dies, daß die Gleichung (3.51)

$$x_\alpha(z_{Det}) = y_\beta(z_{Det}) = 0 \quad (4.22)$$

und die Gleichung

$$x_\gamma(z_{Det}) = y_\delta(z_{Det}) = lV \quad (4.23)$$

erfüllt sein müssen. Die Ebene z_{Det} sei hier die Bildebene und gibt damit die Lage des Detektors an. Die Vergrößerung des Systems wird wieder mit V bezeichnet, die Länge l ist die Normierungslänge aus den Definitionsgleichungen (3.40). Damit sind für den Fall der elementspezifischen Abbildung mindestens vier Bedingungen zu erfüllen. Dabei wird aufgegeben, ein rundes System erzielen zu wollen. Da ein Projektiv das letzte Element in einem Mikroskop ist, spielt dies für die Gesamtabbildung keine Rolle. Allerdings sollte darauf geachtet werden, daß die Neigungen der Feldbahnen nicht zu verschieden voneinander sind, da sonst die Abbildung stark winkelabhängig ist und die Lage der Detektorebene sehr genau eingehalten werden muß.

Der zweite Fall, die Untersuchung des Energieverlustspektrums, ist vor allem dadurch charakterisiert, daß nur eine Richtung abgebildet werden muß. Nach Kap. 2 besitzt das Energiefilter Einschnittssymmetrie und die dispersive Bahn weicht nur im xz –Schnitt von der

optischen Achse ab. Da eine achromatische Bildebene vorliegt, das heißt die axiale Bahn x_α und die dispersive Bahn x_κ besitzen eine gemeinsame Nullstelle, müssen die Forderungen

$$x_\gamma(z_{Det}) = 0 \quad (4.24)$$

und

$$x_\alpha(z_{Det}) = lV_x \quad (4.25)$$

zur Abbildung des Energieverlustspektrums gestellt werden. Demnach muß im xz -Schnitt ein Beugungsbild mit der Vergrößerung V_x abgebildet werden. Die einzige zwingende Einschränkung für den yz -Schnitt ist, daß die Größe des Detektors nicht überschritten werden darf. Natürlich wird in einem Mikroskop entweder der Objektbereich oder die Beugungsebene sehr hoch vergrößert. Die hier geschilderte Abbildung sollte im yz -Schnitt diese hohe Vergrößerung nutzen und die jeweils zugehörige Ebene abbilden. Dadurch wird eine hohe Vergrößerung im Projektiv vermieden und in diesem Schnitt die Anzahl der brechenden Elemente vermindert.

Ein ideales Projektivsystem erlaubt eine optimale Einstellung für beide geschilderten Betriebsarten der Abbildung. In einem ersten Schritt wird ein System zur Festlegung der Fundamentalbahnen im Falle der elementspezifischen Abbildung vorgestellt. Das Ergebnis des Kap. 4.1 lautete, daß im besten Fall zwei symmetrische Quadrupol-Quadrupletts für eine Abbildung mit variabler Vergrößerung von einer festen Ausgangsebene in eine feste Endbildebene geeignet sind. Dabei ersetzt jedes Quadruplett eine Rundlinse in ihren Eigenschaften einer runden Abbildung.

In dieser Betrachtung soll nun die Symmetrieeigenschaft der Felder zugunsten von weniger verwendeten Elementen aufgegeben werden. Dafür wird jedes bisher eingesetzte Quadruplett durch ein Triplet ersetzt. Nach den Ausführungen aus Kap. 4.1 ist klar, daß durch ein Triplet kein vollständiger Ersatz einer Rundlinse zur Verfügung gestellt werden kann. Dazu fehlt ein Parameter. Trotzdem soll die Idee einer Abbildung mit variabler Vergrößerung und fester Gegenstands- und Bildweite durch zwei **Rundlinsenäquivalente** beibehalten werden. Die Symmetrie der Felder wird demnach zugunsten zweier gemeinsam arbeitender Triplets aufgegeben, die diese fehlenden Parameter für die gesamte Abbildung ersetzen muß.

Zur Beschreibung der Arbeitsweise eines solchen Triplets sollen vorerst nur die axialen Fundamentalbahnen zur Überlegung beitragen. Ein Triplet soll als Rundlinsenäquivalent dienen und eine runde Abbildung erzeugen. Hier sei noch einmal erwähnt, daß eine in paraxialer Näherung runde Abbildung gleiche Austrittssteigungen und Austrittsauslenkungen der Bahnen nach sich zieht. Da man dies mit einem Triplet nicht bewerkstelligen kann, hat man die Wahl. In dem hier berechneten Fall sollen gleiche Steigungen zum Ziel führen. Gleiche Auslenkungen würden eine Ebene, in der dies gelten soll auszeichnen. Die Festlegung einer solchen Ebene bedeutet den Verlust eines weiteren Parameters. Außerdem bedeutet die Kontrolle über die Steigungen der Bahnen und damit implizit auch über die Auslenkungen, vor allem für kleine Steigungen eine Kontrolle über die Akzeptanz des Systems. Gerade die Akzeptanz soll optimiert werden. Die Funktionsweise eines solchen Triplets zeigt **Abb. 4.7** in der Näherung aus Kap. 3.5.2. Dort sind parallele Austrittssteigungen zu erkennen, die zu astigmatischen Zwischenbildern führen.

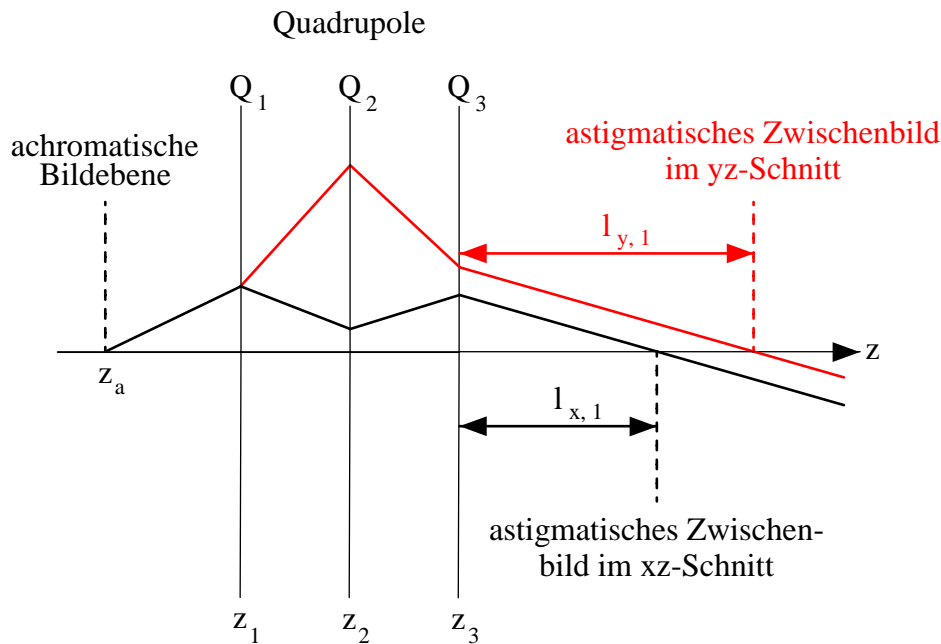


Abbildung 4.7: Eine Skizze zur Funktionsweise des Triplets.

— axiale Bahn im xz -Schnitt, — axiale Bahn im yz -Schnitt.

Zu Beginn dieses Abschnittes wurde festgehalten, daß für die elementspezifische Abbildung nur die vier Bedingungen (4.22) und (4.23) zu erfüllen sind. Demzufolge ist für asymmetrische Systeme eine minimale Anzahl von vier Quadrupolen erforderlich. Da in diesen Forderungen allerdings nichts über die Steigungen in der Endbildebene ausgesagt wird, können diese vorallem für die hier gewünschten hohen Vergrößerungen stark unterschiedlich sein. Dadurch erhält man ein stark vom Winkel abhängiges System, welches hohe Anforderungen an die Justierung des Detektors stellt. In dieser Arbeit soll die Anordnung von zwei symmetrischen Quadrupletts, welche zwei Rundlinsen ersetzen, durch eine Anordnung von zwei asymmetrischen Triplets ersetzt werden. Anstelle der runden Anordnung bei dem Quadruplettsystem zwischen den beiden Rundlinsenäquivalenten, tritt nun die im vorigen Abschnitt geschilderte Forderung nach parallelen Austrittssteigungen. Durch die Aufgabe der Symmetrie und eines runden Systems zwischen den Quadrupolanordnungen gewinnt man demnach Parameter. Im Gegensatz zu der minimal erforderlichen Anzahl von vier Quadrupolen, kann in diesem Fall für jede Vergrößerung der Verlauf der Fundamentalbahnen variiert werden, da sechs Quadrupole zur Verfügung stehen. Ein Quadrupol wird verwendet, um die Forderung nach parallelen Austrittssteigungen der axialen Bahnen zu erfüllen. Ein anderer ist bisher noch völlig frei und kann zur Einstellung der Feldbahnen im letzten Triplet und zur Vermeidung des Problems stark unterschiedlicher Steigungen der Feldbahnen in der Endbildebene verwendet werden. Beide freien Parameter dienen auf diese Weise wiederum der Optimierung der Akzeptanz des Projektivsystems.

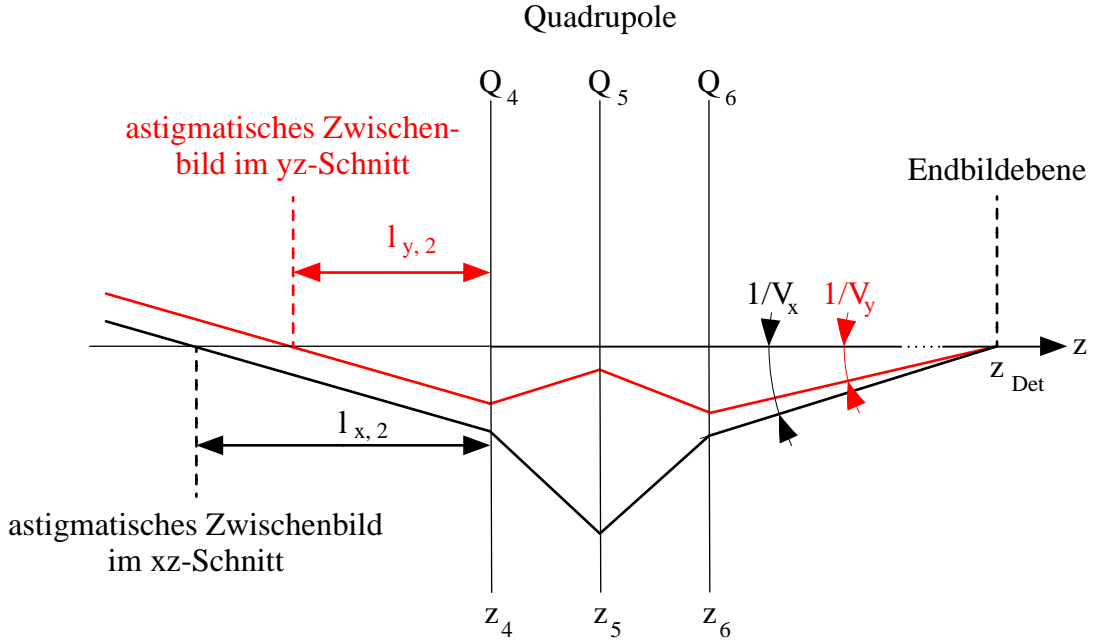


Abbildung 4.8: Eine Skizze zur Funktionsweise des zweiten Triplets mit anamorphotischer Abbildung.

— axiale Bahn im xz -Schnitt, — axiale Bahn im yz -Schnitt.

Die Funktionsweise des zweiten Triplets soll **Abb. 4.8** verdeutlichen. Im Prinzip wurde dazu die **Abb. 4.7** nur an der achromatischen Bildebene gespiegelt. Für die Lösung der paraxialen Bahngleichung (3.35) spielt dies für die Teilchenbewegung keine Rolle, da sie gegenüber der Transformation $z \rightarrow -z$ invariant ist und somit die gleichen Lösungen unabhängig von der Bewegungsrichtung liefert. Diese Invarianz ist vorallem für die analytische Abschätzung der Abbildungseigenschaften wichtig, da sich dadurch in der SCOFF-Näherung sowie der der dünnen Quadrupole die Rechnungen für beide Triplets trennen lassen und somit kurze einfache Gleichungen entstehen. Außerdem wurde auf beide Fundamentalbahnen der Faktor -1 multipliziert, um den Anschluß zum ersten Triplett besser zu kennzeichnen. Für die weiteren Überlegungen werden die Helmholtz-Lagrange Gleichungen (3.49) und die dort berechneten Konstanten (3.50) nützlich sein. Zunächst werden in diesem Kapitel keine Rundlinsen berücksichtigt, so daß der Term, der von der Lamordrehung χ abhängt, verschwindet. Die weiteren Schlußfolgerungen sollen in der Endbildebene durchgeführt werden. Da dort die axialen Fundamentalbahnen verschwinden, gelten die Beziehungen

$$\begin{aligned} x_\gamma(z_{Det}) \, x'_\alpha(z_{Det}) &= -l \\ y_\delta(z_{Det}) \, y'_\beta(z_{Det}) &= -l \end{aligned} \quad (4.26)$$

In der hier verwendeten Normierung wird die Vergrößerung durch die Gleichungen

$$x_\gamma(z_{Det}) = l \, V_x \quad (4.27)$$

$$y_\delta(z_{Det}) = l V_y \quad .$$

beschrieben. Setzt man die Gleichungen (4.27) in die Gleichungen (4.26) ein, ergeben sich die in **Abb. 4.8** eingezeichneten Beziehungen für die Steigungen der paraxialen Fundamentalbahnen x'_α und y'_β in Abhängigkeit der jeweiligen Vergrößerung in der Endbildebene. Zum Einen lassen sich durch diese einfache Überlegung die Vergrößerungen alleine durch die axialen Bahnen festlegen. Zum Anderen zeigt diese Überlegung, daß mit einer Bitriplett-Anordnung auch eine Abbildung mit unterschiedlicher Vergrößerung im xz-Schnitt und im yz-Schnitt möglich ist. Eine Abbildung mit einer Vergrößerung $V_x \neq V_y$ nennt man anamorphotisch. Für den bisher diskutierten Fall der elementspezifischen Abbildung ist natürlich nur eine Abbildung des Objektes sinnvoll, die seine Gestalt nicht verändert. Für die Vergrößerungsmaßstäbe gilt dann $V_x = V_y$ und die axialen Bahnen sind in diesem Fall hinter dem letzten Quadrupol identisch, wie in **Abb. 4.8** zu erkennen ist. Eine anamorphotische Abbildung läßt sich zum Beispiel für die Abbildung des Energieverlustspektrums ausnutzen [Rose 1999]. Darüber wird später mehr gesagt. Die Festlegung der axialen Bahnen in der achromatischen Bildebene und der Endbildebene in der hier geschilderten Weise erfüllt somit automatisch die minimalen Bedingungen der Gleichungen (4.22) und (4.23) für eine stigmatische Abbildung in der Ebene z_{Det} .

Über die Feldbahnen wurden bisher nur die Festlegungen (4.27) getroffen. Über die Steigungen der Bahnen läßt sich nichts aussagen. Dies läßt sich auch mit Hilfe der Helmholtz-Lagrange Gleichungen erklären. In den Gleichungen (4.26) sind die Terme mit den Steigungen der Feldbahnen dadurch verschwunden, da eine Bildebene vorliegt und die axialen Bahnen dort eine Nullstelle haben. Um diese Steigungen festzulegen, müßte eine weitere Forderung an das System gestellt werden. Für ein rundes Gesamtsystem läßt sich wiederum mit Hilfe des Helmholtz-Lagrange'schen Satzes in einer beliebigen Ebene hinter dem letzten Quadrupolfeld die Bedingung $x'_\gamma = y'_\delta$ herleiten. Wie schon geschildert, ist eine solche Forderung für ein Projektivsystem nicht erforderlich und für eine Berechnung sogar nachteilig, da für diese Bedingung das komplette System bis zum letzten Quadrupol berechnet werden muß und sich somit die Berechnung der einzelnen Triplets nicht mehr streng trennen läßt. Viel besser angepaßt an ein Projektivsystem ist, wie schon erwähnt, die Kontrolle dieser Steigungen mit Hilfe eines Quadrupoles, so daß sie in den verschiedenen Schnitten nicht zu sehr voneinander abweichen. Dadurch bleibt ein Parameter zur Optimierung der Akzeptanz übrig. Dieser freie Parameter wird später zur Auswahl einer interessanten Lösung ausgenutzt.

Zur Berechnung dieser Bitriplett-Anordnung müssen beide Triplets aneinander angepaßt werden. Alle verwendeten Größen sind in **Abb. 4.7** und **Abb. 4.8** zu entnehmen. Zunächst ist klar, daß die austretenden Steigungen des ersten Triplets mit den einfallenden des zweiten Triplets übereinstimmen müssen. Daraus ergeben sich die Forderungen

$$x'_\alpha(z_3 + \zeta) = x'_\alpha(z_4 - \zeta) := s_x \quad , \quad (4.28)$$

$$y'_\beta(z_3 + \zeta) = y'_\beta(z_4 - \zeta) := s_y \quad (4.29)$$

für $\zeta \rightarrow 0$. Des weiteren müssen die Auslenkungen der axialen Fundamentalbahnen in der Ebene der astigmatischen Zwischenbilder verschwinden. Der Abstand der beiden Triplets

muß im xz -Schnitt und im yz -Schnitt gleich groß sein und sei mit t bezeichnet. Die Geradengleichung der Elektronenbahn am Ende des ersten Triplett muß zu Beginn des zweiten Triplett fortgesetzt werden. Bezieht man sich bei der Bildung der Geradengleichung auf die Ebene z_3 , ergeben sich die Geradengleichungen

$$x_\alpha(z_4) = s_x t + x_\alpha(z_3) \quad (4.30)$$

$$y_\beta(z_4) = s_y t + y_\beta(z_3) \quad . \quad (4.31)$$

Damit lassen sich die Auslenkungen der Bahnen kurz hinter dem dritten und vierten Quadrupol berechnen. Eine weitere Möglichkeit die Elektronenbahn zu beschreiben ist die Wahl der Bezugsebene im astigmatischen Zwischenbild des jeweiligen Schnittes. Dabei ergeben sich die Geradengleichungen

$$x_\alpha(z_3) = -s_x l_{x,1} \quad , \quad x_\alpha(z_4) = s_x l_{x,2} \quad (4.32)$$

$$y_\beta(z_3) = -s_y l_{y,1} \quad , \quad y_\beta(z_4) = s_y l_{y,2} \quad . \quad (4.33)$$

Mit Hilfe dieser Gleichungen lassen sich die Geraden (4.30) und (4.31) in die einfachen Längenbeziehungen

$$l_{x,1} + l_{x,2} = t \quad (4.34)$$

$$l_{y,1} + l_{y,2} = t \quad (4.35)$$

umschreiben. Die Bedingungen (4.28), (4.29), (4.34) und (4.35) stellen eine stigmatische, anamorphotische Abbildung sicher. Nimmt man zusätzlich noch gleiche Vergrößerungen $V_x = V_y$ an, werden die Gleichungen (4.22) und (4.23) für die gewünschte erster Ordnung stigmatische, verzeichnungsfreie Abbildung der achromatischen Bildebene für die element-spezifische Abbildung erfüllt. Zusätzlich zu diesen vier Forderungen kommt noch die nach gleicher Steigung

$$s_x = s_y \quad , \quad (4.36)$$

wie in den vorigen Abschnitten erläutert. Damit muß die Bitriplett-Anordnung fünf Bedingungen erfüllen.

Um einen ersten Überblick über die Lösungen dieser Anordnung zu erhalten, wird das System mit Hilfe der Näherung dünner Quadrupole aus Kap. 3.5.2 untersucht. Am einfachsten läßt sich für diese Zwecke ein Triplett von der Bildebene in Richtung der astigmatischen Zwischenbilder berechnen. Das zweite Triplett muß demnach von hinten berechnet werden, wie schon weitere vorne ausgeführt wurde. Für das erste Triplett läßt sich bis zur Ebene z_3 schreiben

$$\underline{\underline{M}}^{(1)} = \underline{\underline{G}}(f_3, z_3) \cdot \underline{\underline{L}}(l_2) \cdot \underline{\underline{G}}(f_2, z_2) \cdot \underline{\underline{L}}(l_1) \cdot \underline{\underline{G}}(f_1, z_1) \cdot \underline{\underline{L}}(g) \quad , \quad (4.37)$$

wobei g den Abstand der achromatischen Bildebene z_0 zur Ebene des ersten Quadrupoles z_1 bezeichnet. Die Längen l_1 und l_2 geben den Abstand der Quadrupole Q_1 und Q_2 bzw. der Quadrupole Q_2 und Q_3 an. Das zweite Triplett berechnet sich von der Endbildebene z_{Det} bis in die Ebene des vierten Quadrupoles z_4 zu

$$\underline{\underline{M}}^{(2)} = \underline{\underline{G}}(f_4, z_4) \cdot \underline{\underline{L}}(l_4) \cdot \underline{\underline{G}}(f_5, z_5) \cdot \underline{\underline{L}}(l_5) \cdot \underline{\underline{G}}(f_6, z_6) \cdot \underline{\underline{L}}(b) \quad . \quad (4.38)$$

Der Abstand der Detektorebene z_{Det} bis zur Ebene des letzten Quadrupoles z_6 wird durch die Länge b beschrieben. Die Längen l_4 und l_5 beschreiben den Abstand der jeweiligen Quadrupole. In den weiteren Rechnungen werden wie bei den symmetrischen Systemen wieder die Brechkräfte $d_i = 1/f_i$ verwendet. Zur weiteren Vereinfachung werden die Abstände der Quadrupole $l_1 = l_2 = l_4 = l_5 = a$ als gleich groß angenommen.

Der Anfangsvektor für die axialen Bahnen im ersten Triplet in der Ebene z_0 lautet

$$\mathbf{x}_0^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.39)$$

der Anfangsvektor des zweiten Triplets in der Ebene z_{Det} ergibt sich zu

$$\mathbf{x}_{Det}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1/V_x \\ 0 \\ 1/V_y \end{pmatrix}. \quad (4.40)$$

Die Werte der axialen Bahnen und deren Steigungen in der Ebene z_3 des letzten Quadrupoles des ersten Triplets und in der Ebene z_4 des letzten Quadrupoles des zweiten Triplets lassen sich durch die Matrixprodukte

$$\mathbf{x}_3^{(1)} = \underline{\underline{M}}^{(1)} \mathbf{x}_0^{(1)} \quad (4.41)$$

und

$$\mathbf{x}_4^{(2)} = \underline{\underline{M}}^{(2)} \mathbf{x}_{Det}^{(2)} \quad (4.42)$$

berechnen. Die Ergebnisvektoren dieser beiden Gleichungen bestimmen die Auslenkungen und Steigungen der axialen Bahnen x_α und y_β in den Ebenen z_3 und z_4 . Damit lassen sich die Forderungen (4.28), (4.29), (4.30), (4.31) und (4.36) mit Hilfe der Matrixelemente darstellen. In dieser Reihenfolge ergeben sich die Gleichungen

$$V_x M_{2,2}^{(1)} - M_{2,2}^{(2)} = 0 \quad (4.43)$$

$$V_y M_{4,4}^{(1)} - M_{4,4}^{(2)} = 0 \quad (4.44)$$

$$-V_x \left(M_{1,2}^{(1)} + t M_{2,2}^{(1)} \right) + M_{1,2}^{(2)} = 0 \quad (4.45)$$

$$-V_y \left(M_{3,4}^{(1)} + t M_{4,4}^{(1)} \right) + M_{3,4}^{(2)} = 0 \quad (4.46)$$

$$M_{2,2}^{(1)} - M_{4,4}^{(1)} = 0. \quad (4.47)$$

Die erste und dritte dieser Gleichungen beziehen sich dabei alleine auf den xz -Schnitt und die zweite und vierte nur auf den yz -Schnitt. Die benutzten Matrizen in diesen Schnitten unterscheiden sich einzig durch das Vorzeichen der jeweiligen Brechkräfte. Durch geschickte Addition und Subtraktion dieser Gleichungen lassen sich insbesondere für $V_x = V_y$ einfachere Beziehungen herleiten. Der Kürze wegen sei das resultierende Gleichungssystem für die Einschränkung $V_x = V_y := V$ hier dargestellt:

$$(g + a) d_2 V + 2 V g d_1 + 2 b d_6 + (b + a) d_5 = 0 \quad (4.48)$$

$$(2 a + g + t) V + b + 2 a + b d_6 a^2 d_5 + t a (g + a) d_3 d_2 V + g a (a + t) d_2 d_1 V + 2 V t g d_1 a d_3 = 0 \quad (4.49)$$

$$(b + 2 a) d_4 + b d_6 + (b + a) d_5 + b d_4 d_5 d_6 a^2 = 0 \quad (4.50)$$

$$V - 1 - 2 b d_4 d_6 a - a (a + b) d_4 d_5 - b d_6 a d_5 + a (g + a) d_3 d_2 V + V g d_1 a d_2 + 2 V g d_1 a d_3 = 0 \quad (4.51)$$

$$g d_1 + (g + a) d_2 + (g + 2 a) d_3 + g d_1 a^2 d_2 d_3 = 0 \quad (4.52)$$

Diese Gleichungen lassen sich in geeigneter Weise nach d_3 , d_4 , d_1 , V und d_2^2 auflösen. Der Parameterraum ist abhängig von den Brechkraften d_5 und d_6 . Nimmt man z. B. die Werte $a = 20$ mm, $g = 80$ mm, $b = 468.5$ mm und $t = 20$ mm an, ergeben sich realisierbare Brechkräfte für einen großen Vergrößerungsbereich. In Abhängigkeit des Parameterraumes ist die Vergrößerung in **Abb. 4.9** dargestellt. In dieser Abbildung sind auch die Pole des gelösten Gleichungssystems zu erkennen. Für eine Vergrößerung von etwa $V \approx 36$ sind die Fundamentalbahnen für dieses Beispiel in **Abb. 4.10** gezeigt. Der Lösungsraum ist somit für realisierbare kleine Brechkräfte in einem großen Vergrößerungsbereich einstellbar. Für eine spezielle Vergrößerung existieren mehrere Lösungen. Eine Zoom-Optik ist mit einem solchen System zu erzeugen und durch die Größe des Lösungsraumes läßt sie sich auch im Hinblick auf die Akzeptanz optimieren. Diese Bitriplett-Anordnung wird deshalb für die elementspezifische Abbildung des Projektivsystems vorgeschlagen.

Da die Ergebnisse in den Rechnungen mit dünnen Quadrupolen vielversprechend sind, sollen sie jetzt im Rahmen der SCOFF-Näherung aus Kap. 3.5.1 bestätigt werden. Die einzige Änderung in der oben dargestellten Rechnung besteht in der Berechnung der Matrizen $\underline{M}^{(1)}$ und $\underline{M}^{(2)}$ eines jeden Triplets. Dort werden jetzt für die Matrizen eines Quadrupoles $\underline{G}(g_i, z)$ aus Kap. 3.5.1 verwendet. Da zur Berechnung der Bedingungsgleichungen immer die komplette Länge der Felder berücksichtigt werden muß, ist es sinnvoll mit den normierten Quadrupolstärken $q_i = g_i(d_i) d_i$ zu rechnen, wie schon in Kap. 3.5.1 bei der Berechnung der Kardinal-elemente eingeführt. Die Länge der Quadrupolfelder wurde zu d_i festgelegt, während die Feldstärken mit $g_i(d_i) = \sqrt{G_i(d_i)}$ durch die Funktionen G_i aus Gleichung (3.110) bestimmt sind. Der Index i steht hier für den i 'ten Quadrupol. Diese normierten Quadrupolstärken sind die Argumente der trigonometrischen und hyperbolischen Funktionen die durch diese Matrizenmultiplikationen zu Stande kommen. Die Bedingungsgleichungen (4.28), (4.29), (4.30), (4.31) und (4.36) lassen sich genau wie für die dünnen Quadrupole ausrechnen, sollen aber wegen ihrer Länge hier nicht aufgeführt werden. Eine Auflösung dieses nichtlinearen Gleichungssystems ist durch die trigonometrischen und hyperbolischen Funktionen analytisch nicht möglich.

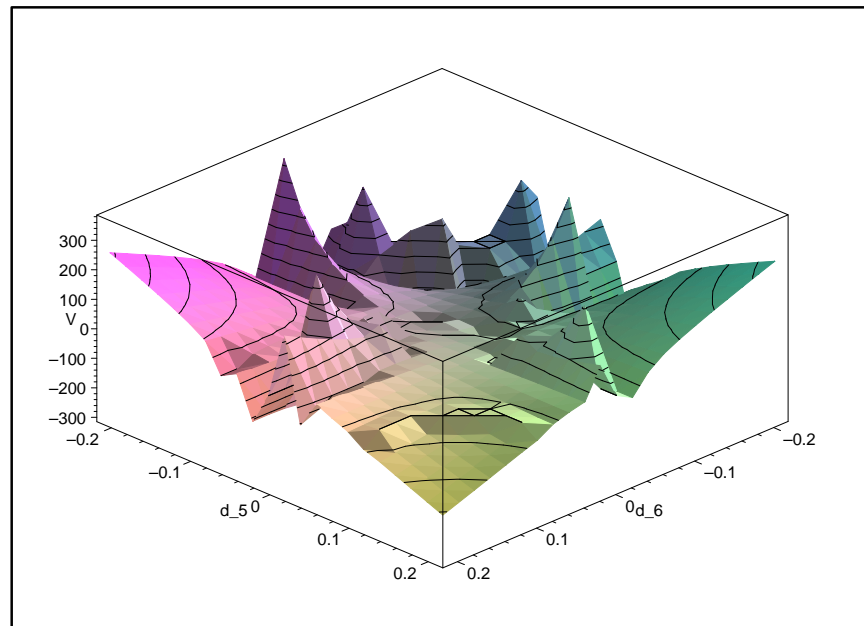


Abbildung 4.9: Die Vergrößerung der Bitriplett-Anordnung in Abhängigkeit des Parameterraumes der Brechkräfte d_5 und d_6 .

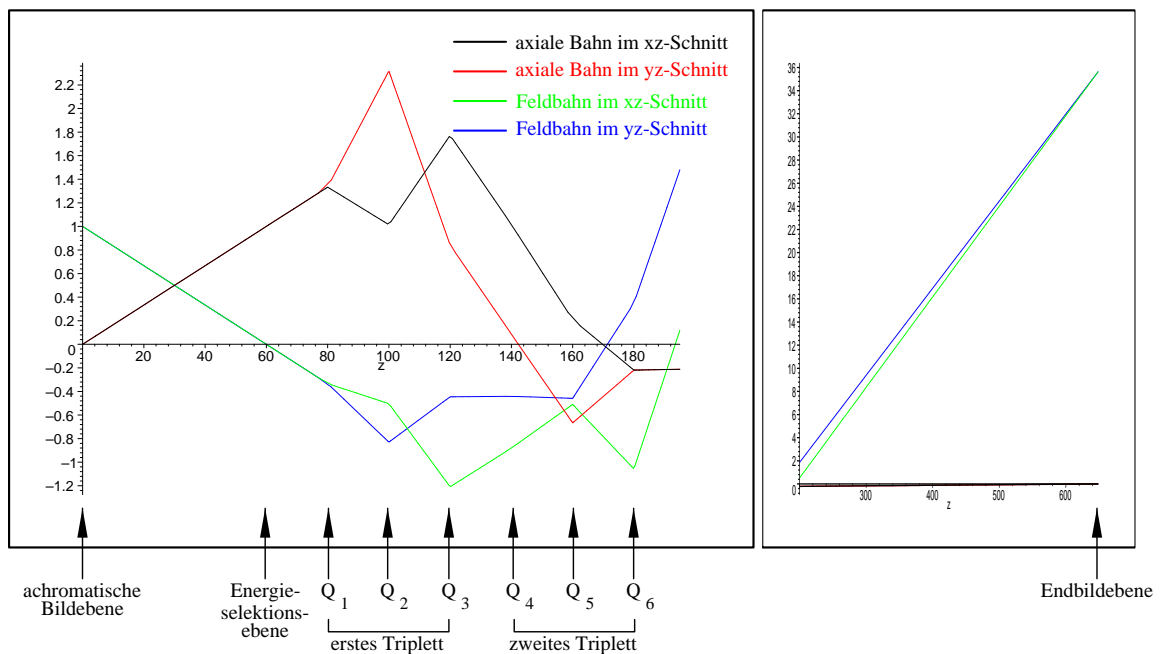


Abbildung 4.10: Die Fundamentalbahnen eines abbildenden Bitriplets mit Vergrößerung $V \approx 36$.

Aus diesem Grund muß dieses Gleichungssystem im Falle der SCOFF-Näherung mit Hilfe eines iterativen Newtonverfahrens gelöst werden. Das dabei auftretende lineare Gleichungssystem wird mit Hilfe einer QR-Zerlegung nach Householder [Spellucci 1988] gelöst. Da hier aber ein System vorliegt, in dem fünf Gleichungen mit sechs Parametern gelöst werden sollen, bleibt ein Parameter frei. Die Lösungsmenge wird keine eindeutige Lösung haben, sondern eine Lösungshyperfläche in diesem sechs dimensional Parameterraum der q_i sein. In einem FORTRAN-Programm wurde ein Newtonverfahren implementiert, daß diese Fläche etwas systematischer absucht, als es durch die schrittweise Änderung eines der sechs normierten Quadrupolstärken für den Startwert des Newtonverfahrens und eine erneute Iteration der Lösung möglich ist. Das gesuchte Verfahren soll auf die Problemstellung eines Projektivsystems angepaßt sein.

Bei Projektivsystemen aus Rundlinsen ist eine optimale Einstellung für eine niedrige Verzeichnung dadurch gewährleistet, daß die letzte Projektivlinse im Brechkraftmaximum arbeitet [Riecke 1982]. Überträgt man dieses Konzept auf die Bitriplett-Anordnung, so sollte das letzte Triplet im Brechkraftmaximum betrieben werden. Der noch freie Parameter sollte demnach möglichst die beiden letzten Quadrupole beeinflussen. Die Strahlaufweitung durch die Feldbahnen läßt sich auf diese Weise im letzten Quadrupol begrenzen. Zur Erläuterung sei der Extremfall angemerkt, daß die Brechkraft des letzten Quadrupoles fast Null ist. In diesem Fall beeinflußt er die paraxialen Bahnen nur gering, so daß durch die erzeugte hohe Vergrößerung im vorletzten Quadrupol die Achsabstände der Feldbahnen im letzten Quadrupol sehr groß werden müssen.

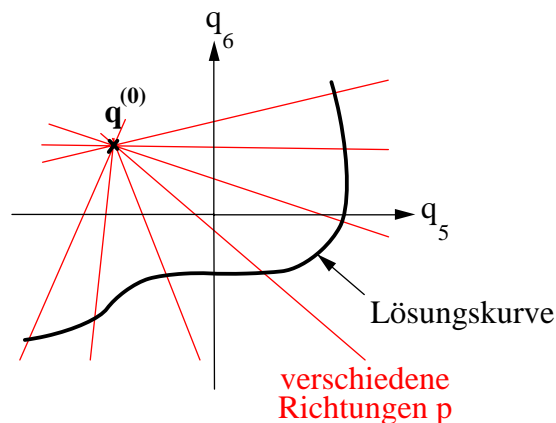


Abbildung 4.11: Geometrisch anschauliche Darstellung der Bestimmung der Lösungskurve der Bitriplett-Anordnung.

Schon bei der Berechnung des Systems mit dünnen Quadrupolen wurde dies berücksichtigt, da in Abb. 4.9 die Vergrößerung mit den Brechkraften d_5 und d_6 eingestellt wird. Diese

sollten möglichst groß gewählt werden und das Ergebnis dann als Startwert

$$\mathbf{q}^{(0)} = \begin{pmatrix} q_1^{(0)} \\ q_2^{(0)} \\ q_3^{(0)} \\ q_4^{(0)} \\ q_5^{(0)} \\ q_6^{(0)} \end{pmatrix} \quad (4.53)$$

für das Newtonverfahren verwendet werden. Der Änderungsvektor $\Delta \mathbf{q}^{(n)}$, der mit dem Newtonverfahren im nächsten Iterationschritt bestimmt wird, koppelt die Brechkraft des letzten Quadrupoles q_6 mit dem vorletzten Quadrupol q_5 durch die Beziehung $\Delta q_6^{(n)} = p \Delta q_5^{(n)}$. Dabei ist p ein fest vorgegebener Faktor. Da dieser Faktor bei der Iteration nicht geändert wird, bedeutet dieses Vorgehen geometrisch (s. **Abb. 4.11**), daß in der $q_5 q_6$ -Ebene eine Richtung ausgewählt wird, entlang der die Lösung gesucht wird. Führt man dieses Verfahren für verschiedene Werte von p durch, was gleichbedeutend mit verschiedenen gewählten Richtungen ist, stellen die gefundenen Lösungen die gesuchte Lösungskurve in der $q_5 q_6$ -Ebene dar. Eine erste Vorselektion dieser Lösungsmenge erfolgt nach dem zuvor Gesagten dadurch, daß die Brechkräfte q_5 und q_6 möglichst groß sein sollten. Lösungen in denen die Brechkraft q_4 größer als diese beiden ist, erweisen sich aus den genannten Gründen für die Fundamentalbahnen als ungünstig. Die Akzeptanz solcher Systeme ist schlechter. Diese Methode der Newton-Iteration erweist sich demnach als auf das Problem angepaßt und ermöglicht eine vollständige Bestimmung der Lösungsmenge. In den nachfolgenden Abschnitten werden weitere Einschränkungen dieser Lösungsmenge geschildert und das Projektivsystem damit für die elementspezifische Abbildung optimiert.

Erwähnt werden sollte noch, daß für die Bedingung paralleler Steigungen (4.36) kleine Abweichungen zugelassen werden können. Die Lösungen eines solchen Systems ergeben allerdings keine wesentlichen Vorteile, so daß hier eine exakte Erfüllung dieser Bedingung gefordert werden darf.

Zu Beginn dieses Kapitels wurde ein zweiter Abbildungsmodus erwähnt, den das Projektivsystem im Anschluß an ein Energiefilter beherrschen muß. Für die Abbildung des Energiespektrums wurden auch schon die mindestens notwendigen Bedingungen (4.24) und (4.25) an die Fundamentalbahnen erklärt. Diese legen den xz -Schnitt fest. Im yz -Schnitt muß sichergestellt werden, daß das Elektronenbündel auf dem Detektor nicht größer als dieser wird. Die Bitriplett-Anordnung ermöglicht eine anamorphotische Abbildung der Spektrumsebene. Demnach wird in einem solchen Fall ein Beugungsbild auf den Detektor abgebildet. Die Vergrößerung im xz -Schnitt wird durch die dispersive Bahn festgelegt, die Vergrößerung im yz -Schnitt durch die Größe des Beugungsbildes in der Selektionsebene. Da in einem Mikroskop das Beugungsbild stark verkleinert wird (siehe z. B. **Abb. 4.8**), müssen die Vergrößerungen in beiden Schnitten stark unterschiedlich gewählt werden. Ein Beispiel für eine solche Einstellung des Bitriplets ist in [Rose 1999] dargestellt.

Um diesen Nachteil zu vermeiden, kann auch im yz -Schnitt ein Bild erzeugt werden. Dies zieht die Forderungen

$$y_\beta(z_{Det}) = 0 \quad (4.54)$$

und

$$y_\delta(z_{Det}) = lV_y \quad (4.55)$$

nach sich. Geometrisch bedeutet eine solche Abbildung, daß jeder Punkt des Spektrums in der Beugungsebene in einen Bildstrich in der Detektorebene abgebildet wird. Die Vergrößerung V_y sollte so gewählt werden, daß der Bildstrich mit der Breite des Detektors übereinstimmt. Da vor dem Projektiv das Bild vergrößert wurde, liegen in diesem Fall die Vergrößerungen V_x und V_y in der gleichen Größenordnung. Eine astigmatische Abbildung ist für die Übertragung des Energieverlustspektrums optimal angepaßt.

Das Projektivsystem soll beide Arten der Abbildung ermöglichen. Um eine unnötig große Anzahl von Elementen zu vermeiden, werden die gleichen Quadrupole des Bitriplett Systems für die astigmatische Abbildung verwendet. Demnach sind die vier Forderungen (4.24), (4.25), (4.54) und (4.55) durch die sechs Parameter der Quadrupolbrechkräfte zu erfüllen. Das Aufstellen der Gleichungen erfolgt wie bisher durch ausmultiplizieren der 13 jeweiligen Matrizen zunächst für dünne Quadrupole aus Kap. 3.5.2 und dann in der Kastenfeldnäherung aus Kap. 3.5.1. Für die Gesamtmatrix $\underline{\underline{M}}_{ges}$ ergeben sich die vier Bedingungen

$$\begin{aligned} l M_{ges1,1} - M_{ges1,2} &= 0 \\ M_{ges1,2} - l V_x &= 0 \\ M_{ges3,4} &= 0 \\ l M_{ges3,3} - M_{ges3,4} - l V_y &= 0 \end{aligned}$$

oder einfacher

$$\begin{aligned} M_{ges1,1} - V_x &= 0 \\ M_{ges1,2} - l V_x &= 0 \\ M_{ges3,4} &= 0 \\ M_{ges3,3} - V_y &= 0 \quad . \end{aligned} \quad (4.56)$$

Da die entstehenden Gleichungen nichtlinear oder sogar transzendent sein werden, muß ein Lösungsverfahren gefunden werden, daß den gesamten Lösungsraum absucht.

Um nichtlineare transzendente Gleichungssysteme zu lösen, bietet sich das mehrdimensionale Newtonverfahren, bzw. in diesem Fall für unterbestimmte Gleichungssysteme das Gauß-Newton-Verfahren an. Faßt man die oben genannten Bedingungsgleichungen (4.56) in dem Vektor $\mathbf{F}(\mathbf{q}) = \mathbf{0}$ zusammen, läßt sich das Newton-Verfahren schreiben als

$$\underline{\underline{F'}}(\mathbf{q}^{(k)}) \Delta \mathbf{q}^{(k)} = -\mathbf{F}(\mathbf{q}^{(k)}) \quad (4.57)$$

mit

$$\Delta \mathbf{q}^{(k)} = \mathbf{q}^{(k+1)} - \mathbf{q}^{(k)} \quad . \quad (4.58)$$

Die Jakobimatrix $\underline{\underline{F'}}(\mathbf{q}^{(k)})$ ist in diesem Fall eine (4×6) -Matrix. Die Lösungsmenge dieses Gleichungssystems wird nicht eindeutig sein, sondern vielmehr eine Fläche im Parameterraum beschreiben. Aus diesem Grund verwendet man besser das Gauß-Newton-Verfahren. Ist der Rang der Jakobimatrix gleich n , läßt sich die Pseudoinverse [Deuffhard 1993]

$$\underline{\underline{A}}^+ = (\underline{\underline{A}}^T \underline{\underline{A}})^{-1} \underline{\underline{A}}^T \quad \underline{\underline{A}} \in \text{Mat}_{m,n}(\mathbb{R}) \quad (4.59)$$

verwenden. Das Gleichungssystem (4.57) läßt sich dann lösen:

$$\Delta \mathbf{q}^{(k)} = -\underline{\underline{F'}}(\mathbf{q}^{(k)})^+ \mathbf{F}(\mathbf{q}^{(k)}) \quad . \quad (4.60)$$

Für die Pseudoinverse $\underline{\underline{A}}^+$ eines linearen Ausgleichsproblems $\|\underline{\underline{A}}\mathbf{x} - \mathbf{b}\| = \min$ läßt sich zeigen [Deuffhard 1993], daß der Vektor $\underline{\underline{A}}^+\mathbf{b}$ die Lösung eindeutig bestimmt, solange der Rang der Matrix $\underline{\underline{A}}$ maximal gleich n ist. Ist der Rang kleiner n , ist die Lösung nicht mehr eindeutig und es läßt sich eine formale Matrix $\underline{\underline{A}}^+$ einführen, für die Definition (4.59) nicht mehr gilt. Allgemeiner läßt sich die Pseudoinverse definieren als diejenige Matrix, dessen Vektor $\hat{\mathbf{x}} = \underline{\underline{A}}^+\mathbf{b}$ senkrecht auf dem Unterraum des Kerns der Matrix $\underline{\underline{A}}$ steht und er somit die kleinste Lösung $\hat{\mathbf{x}}$ von $\|\underline{\underline{A}}\mathbf{x} - \mathbf{b}\| = \min$ ist. Der betrachtete Unterraum ist der affin verschobene Kern der Matrix $\underline{\underline{A}}$. Als Verschiebungsvektor $\hat{\mathbf{x}}$ wird derjenige Vektor gewählt, der den kleinsten Abstand zum Unterraum aufweist [Deuffhard 1993]. Der Projektionsoperator auf das orthogonale Komplement des Kerns von $\underline{\underline{A}}$ lautet danach

$$\underline{\underline{P}} = \underline{\underline{A}}^+ \underline{\underline{A}} \quad . \quad (4.61)$$

Falls der Rang der Matrix $\underline{\underline{A}}$ maximal ist, ist die Lage klar. Die Gleichung (4.59) läßt sich anwenden, die Pseudoinverse ist die Linksinverse der Matrix $\underline{\underline{A}}$, womit der Kern der Matrix $\underline{\underline{A}}$ der Nullmenge entspricht. Sobald der Kern der Matrix $\underline{\underline{A}}$ nicht die leere Menge ist, ist die Umkehrabbildung von $\underline{\underline{P}}$ des Bildraumes von $\underline{\underline{A}}^+$, des orthogonalen Komplementes des Kerns von $\underline{\underline{A}}$, zur Urbildmenge \mathbb{R}^n nur noch injektiv. Grundlage dieser Überlegungen der Abbildung der Matrix $\underline{\underline{A}}$ vom \mathbb{R}^n in den \mathbb{R}^m ist zum einen, daß der Bildraum von $\underline{\underline{A}}$ im \mathbb{R}^m isomorph zum Bildraum von $\underline{\underline{A}}^+$ im \mathbb{R}^n ist, und zum anderen, daß wie schon gesagt, der Bildraum von $\underline{\underline{A}}^+$ dem orthogonalen Komplement des Kerns der Abbildung der Matrix $\underline{\underline{A}}$ entspricht. Zur anschaulichen Darstellung dieses Sachverhaltes sei auf das kommutative Diagramm auf S. 88 von [Deuffhard 1993] ausdrücklich hingewiesen.

Diese allgemeine Definition der Pseudoinversen läßt sich auf Gleichung (4.60) anwenden. Zur expliziten Lösung müssen nach [Deuffhard 1993] nur ein Vektor des Kerns der Jakobimatrix

$$\underline{\underline{F'}}(\mathbf{q}^{(k)})^t \mathbf{q}^{(k)} = 0 \quad , \quad (4.62)$$

mit anderen Worten einen Tangentenvektor an die Lösungsfläche, und eine beliebige Lösung $\mathbf{z}(\mathbf{q}^{(k)}) = \Delta \mathbf{q}^{(k)}$ des unterbestimmten Problems (4.57) bestimmt werden. Beide lineare Gleichungssysteme lassen sich numerisch mit Hilfe der QR-Zerlegung nach Householder [Spellucci 1988] lösen. Dann gilt

$$\Delta \mathbf{q}^{(k)} = -\underline{\underline{F'}}(\mathbf{q}^{(k)})^+ \mathbf{F}(\mathbf{q}^{(k)}) = \underline{\underline{F'}}(\mathbf{q}^{(k)})^+ \underline{\underline{F'}}(\mathbf{q}^{(k)}) \mathbf{z}(\mathbf{q}^{(k)}) \quad . \quad (4.63)$$

Das Matrizenprodukt des letzten Terms dieser Gleichung entspricht genau dem oben eingeführten Projektionsoperator $\underline{\underline{P}}$. Die kürzeste Korrektur für $\Delta \mathbf{q}^{(k)}$ ergibt sich nach diesen Ausführungen demnach als Projektion auf das orthogonale Komplement des Kerns von $\underline{\underline{F'}}(\mathbf{q}^{(k)})$ zu

$$\Delta \mathbf{q}^{(k)} = \mathbf{z}(\mathbf{q}^{(k)}) - \frac{\langle \mathbf{t}(\mathbf{q}^{(k)}), \mathbf{z}(\mathbf{q}^{(k)}) \rangle}{\langle \mathbf{t}(\mathbf{q}^{(k)}), \mathbf{t}(\mathbf{q}^{(k)}) \rangle} \mathbf{t}(\mathbf{q}^{(k)}) \quad . \quad (4.64)$$

Diese letzte Gleichung gilt aber nur bei Rangdefekt eins, da z. B. eine Fläche schon zwei linear unabhängige Tangentialvektoren besitzt.

In dieser Arbeit werden nur solche Verfahren mit Randeﬀekt eins berücksichtigt. Das nicht-lineare Gleichungssystem (4.56) wird dabei als parameterabhängiges System aufgefaßt, daß mittels der tangentialen Fortsetzungsmethode [Deuﬂhard 1993] gelöst wird. Dabei werden entlang der Lösungskurve die Tangentialvektoren zur Festlegung der nächsten Startwerte des Gauß–Newton–Verfahrens genutzt. Eine normierte Quadrupolbrechkraft wird dabei als Parameter angesehen. Eingesetzt werden die FORTRAN Unterprogramme PITCON von [Rheinboldt 1983] und ALCON1 von [Deuﬂhard 1984]. Beide Verfahren nutzen eine automatische Schrittweitensteuerung und können Umkehrpunkte der Lösungskurve berechnen. Der ALCON–Algorithmus berechnet außerdem Verzweigungspunkte. Da beide Verfahren nur eindimensionale Kurven verfolgen können, wurde im Gleichungssystem eine Quadrupolstärke als konstant angenommen, die Lösungskurve berechnet und danach jeder Punkt dieser Lösungskurve als Startwert für eine neue Lösungsverfolgung in Richtung des bisher festen Parameters gestartet. Ein anderer Parameter wurde dabei jetzt konstant gehalten. Bei diesem Vorgehen wurde der PITCON–Algorithmus ausgenutzt, da er bei jedem Lösungsschritt einen neuen lokalen Parameter zur Parametrisierung des Gleichungssystems nutzt. Auf diese Weise konnte der gesamte Lösungsraum durchsucht werden. Dies war allerdings nur für die Näherung dünner Quadrupole aus Kap. 3.5.2 notwendig.

Beide Verfahren benötigen allerdings zu Beginn einen Startwert an dem die Lösungsverfolgung ansetzen kann. Das Gleichungssystem mit sechs Quadrupolen ließ sich in der Näherung für dünne Quadrupole nur noch in zwei Gleichungen umformen, so daß es schwierig war anhand des Graphen dieser beiden Gleichungen Startwerte zu bestimmen. Da wie oben geschildert ein Parameter für die Lösungsverfolgung sowieso festgehalten werden muß, läßt sich dies für die Startwertberechnung ausnutzen. Systeme mit vier oder fünf Quadrupolen lassen sich in der Näherung dünner Quadrupole noch analytisch auﬂösen. Diese Lösungen wurden als Startwerte verwendet, wobei bei der Berechnung der ersten Lösungskurve die festgehaltene Quadrupolstärke Null war. Erst bei der Berechnung der zweiten Lösungsverfolgung mit den Startwerten entlang dieser Kurve wurde dieser Quadrupol als Parameter benutzt und somit der komplette Lösungsraum bestimmt.

Ein Beispiel für eine Lösung in der Näherung dünner Quadrupole zeigt **Abb. 4.12**. Die Fundamentalbahnen sind für ein solches extremes Energiefenster im Sinne der zweidimensionalen Akzeptanz im xz –Schnitt optimiert. Dies ist in diesem Fall an dem Verlauf der axialen Bahn im xz –Schnitt bzw. der von ihr linear abhängigen dispersiven Bahn zu erkennen. Das hier vorgestellte Verfahren erweist sich gerade in solchen extremen Fällen als brauchbar. Die

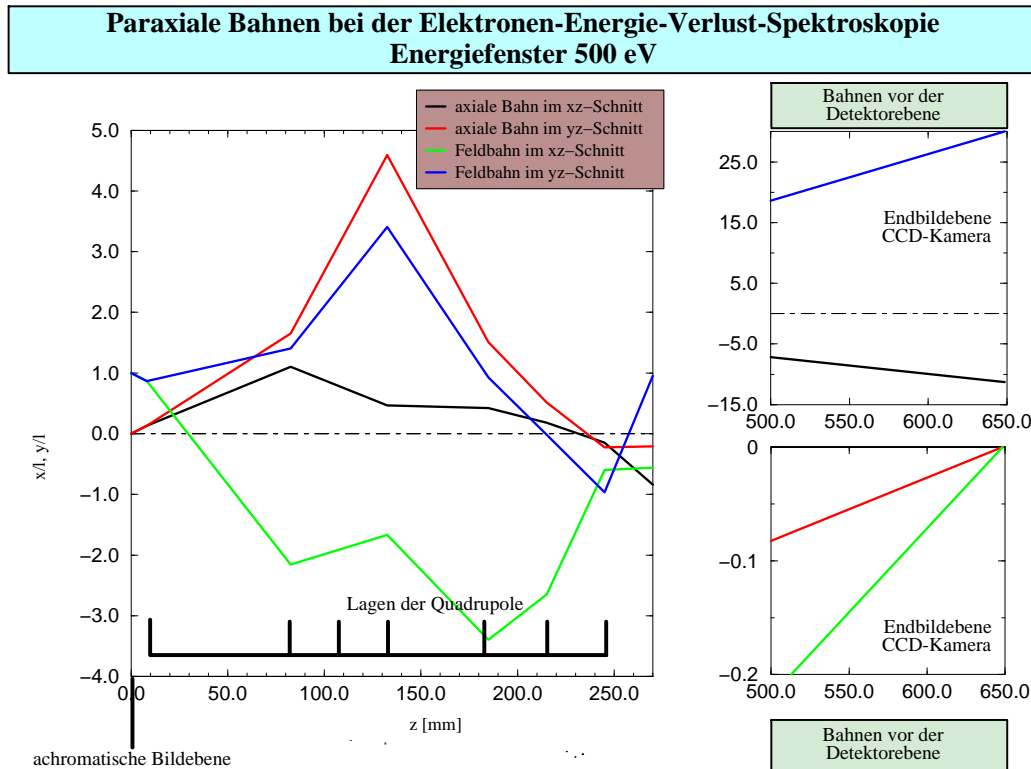


Abbildung 4.12: Die Fundamentalbahnen in der Näherung dünner Quadrupole für die Abbildung des Energieverlustspektrums mit einem Energieverlustfenster von 500 eV.

Vergrößerung im yz -Schnitt ist für die astigmatische Strichabbildung auf die volle Breite des Detektors aufgezogen. Das Bildfeld beträgt dabei 1 mm in der achromatischen Bildebene.

Zur Bestimmung des Lösungsraumes in der Näherung der kastenförmigen Quadrupolfelder aus Kap. 3.5.1 können die optimalen Lösungen der dünnen Quadrupole direkt als Ausgangspunkte der Lösungsverfolgung genutzt werden. An dieser Stelle liefert allerdings nur der ALCON-Algorithmus vernünftige Lösungen. Eine weitere Lösungsverfolgung entlang der vorher festgehaltenen Quadrupolstärke war nicht erforderlich, da die optimale Lösung zu meist in der Nähe der Ausgangslösung und damit in der Nähe der umgerechneten Lösung für dünne Quadrupole lag. Beispiele für Fundamentalbahnen, die durch solche Rechnungen erhalten wurden, finden sich im Kap. 4.6.

Auf diese Weise sind die Verfahren zur Berechnung der Fundamentalbahnen im kompletten Lösungsraum für die Bitriplett-Anordnung sowie der Abbildung des Energiespektrums festgelegt. In den nachfolgenden Kapiteln werden die Forderungen für ein optimales System diskutiert. Das Verfahren zur Bestimmung des Lösungsraumes der Bitriplett-Anordnung konnte auf die Strichabbildung des Energiespektrums nicht angepaßt werden, da der Ansatz in diesem Fall sehr viel allgemeiner erfolgt. Für eine variable Vergrößerung gibt es im Falle der

Spektrumsabbildung keine dem Problem angepaßten Forderungen, die von vornherein die Lösungsmenge einschränken sollten.

4.3 Berücksichtigung der Bildfehler

In diesem Abschnitt wird auf die Berechnung der Bildfehler in einem Projektivsystem eingegangen. Kriterien werden vorgestellt, nach denen beurteilt werden kann, welchen Einfluß sie auf die Qualität der Abbildung und auf die Größe der Akzeptanz haben. In [Uhlemann 1996] wird eine ideale Akzeptanz eines Energiefilters vorgestellt. Sie gilt unter der Voraussetzung der völligen Abwesenheit von Bildfehlern. Mit der Optimierung der idealen Akzeptanz haben sich die Kapitel 4.1 und 4.2 befaßt.

Natürlich beeinflussen auch die Bildfehler die Akzeptanz [Uhlemann 1996, Krivanek 1995]. Am günstigsten wäre es demnach, alle relevanten Fehler zumindest in den niedrigsten Rängen zu korrigieren. Dazu bieten sich die Quadrupolanordnungen aus Kap. 4.1 an. Bei einer Abbildung mit symmetrieerhaltender Vergrößerung verschwinden Bildfehler mit antisymmetrischen Integranden bezüglich der Symmetrieebene [Degenhardt 1992]. Aus diesem Grund werden Energiefilter zumeist doppelsymmetrisch aufgebaut, so daß die geometrischen Bildfehler zweiter Ordnung außerhalb des Systems verschwinden. Ein Projektiv hat aber eine Vergrößerung ungleich Eins. Aus diesem Grund könnte man ein solches symmetrisches System nur als vorgeschaltetes Element zu Korrektur der dominierenden Bildfehler verwenden, wie es in [Rose 1970] vorgeschlagen wird, oder der erste auftretende Fehlerrang müßte komplett korrigiert werden. Dies würde eine zusätzliche Erhöhung der verwendeten Elemente bedeuten und ist aus diesem Grund für Projektive abzulehnen.

Des weiteren erkennt man an den Gleichungen (3.35) und (3.123), daß durch gekreuzte elektrische und magnetische Quadrupolfelder die Farbfehler zweiten Ranges korrigiert werden könnten. Leider zeigt sich, daß für große Säulenspannungen ($\Phi_0 > 100 \text{ kV}$) die dafür benötigten elektrischen Quadrupolfeldstärken zu groß sind. Demnach verbleiben zur Korrektur von Bildfehlern nur zusätzliche magnetische Multipolfelder für die hier vorgeschlagenen asymmetrischen Anordnungen aus Kap. 4.2. Dabei soll allerdings die Anzahl der verwendeten Elemente beschränkt werden.

Die Berechnung der Bildfehler wurde in Kap. 3.3.3 geschildert. Analytische Ausdrücke für die Farbfehler zweiten Ranges wurden in den Gleichungen 3.123 und 3.130 in der Kastenfeldnäherung bzw. der Näherung dünner Quadrupole angegeben. In dieser Arbeit werden zusätzlich noch die Fehler dritten Ranges berechnet, da hier die ersten reinen geometrischen Bildfehler von dritter Ordnung auftreten. Bisher wurden nur die Anteile ersten und zweiten Ranges der Entwicklung der Variationsfunktion (3.28) in allgemeiner Form angegeben. Da die allgemeine Angabe von höheren Termen dieser Entwicklung unübersichtlich lang ausfällt, sollen im folgenden nur magnetische Quadrupol- und Oktupolfelder berücksichtigt

werden. Die Variationsfunktion dritten und vierten Ranges lautet dann

$$\mu^{(3)} = \frac{1}{4} \frac{U}{\sqrt{\Phi^*}} \Lambda w' \bar{w}' \kappa + \mathcal{O}(\kappa^3) \quad (4.65)$$

$$\mu^{(4)} = \mu^{(4,R)} + \mu^{(4,Q)} + \mu^{(4,O)} \quad , \quad (4.66)$$

wobei der runde Anteil der Abbildung durch

$$\mu^{(4,R)} = -\frac{1}{8} \sqrt{\Phi^*} w' \bar{w}' \left(w' \bar{w}' + \frac{1}{2} \frac{U^2}{\Phi^{*2}} \kappa^2 \right) + \mathcal{O}(\kappa^4) \quad , \quad (4.67)$$

der Quadrupolanteil durch

$$\mu^{(4,Q)} = \frac{1}{8} \frac{\Lambda v_0}{\sqrt{\Phi^*}} \Re \left(i \Psi_2' \bar{w}^2 \left(\bar{w}' w - \frac{1}{3} w' \bar{w} \right) \right) \quad (4.68)$$

und der Oktopolanteil durch

$$\mu^{(4,O)} = \frac{1}{2} \frac{\Lambda v_0}{\sqrt{\Phi^*}} \Re (i \Psi_4 \bar{w}^4) \quad (4.69)$$

gegeben ist. Zur Berechnung der Gleichung (3.76) wird für das verkürzte Eikonal die Form

$$m_E^{(4)} = \mu^{(4)} [w^{(1)}] + D^{(2)} \mu^{(3)} [w^{(1)}] + \mu^{(2)} [w^{(2)}] \quad (4.70)$$

gewählt. Die Auswertung der Gleichung (3.76) erfolgt wiederum mit Hilfe eines Computeralgebra Programmes.

Wie an den Formeln zu erkennen, sind die Bildfehler dritten Ranges innerhalb der SCOFF-Näherung aus Kap. 3.5.1 analytisch zu berechnen. Sie sind z. B. in [Hawkes 1966] oder [Dymnikov 1965b] angegeben. Dort werden allerdings keine dispersive Bahn x_κ und keine Kombinationsfehler durch die Farbfehlerbahnen zweiten Ranges berücksichtigt. Es zeigt sich, daß vor allem diese Terme des verkürzten Eikonals vierten Ranges (4.70), die von den Bahnen zweiten Ranges abhängen, innerhalb der SCOFF-Näherung so kompliziert werden, daß eine analytische Auswertung keine Vorteile mehr einbringt. Die transzendenten trigonometrischen und hyperbolischen Funktionen treten so häufig auf, daß eine numerische Integration genauer und schneller ist. Aus diesem Grund werden die Bildfehler dritten Ranges in dieser Arbeit komplett durch eine numerische Integration berechnet.

Zur Kontrolle dieser numerischen Integration werden dabei zwei Verfahren eingesetzt, die Gauß-Quadratur [Spellucci 1990] und die Romberg-Quadratur [Deuffhard 1982] mit Trapeznäherung. Nach der Kontrolle wird zur schnelleren Auswertung nur noch die Romberg-Quadratur berücksichtigt. Zur praktischeren Berechnung sortiert man die Gleichung (3.65) nach den Parametern a_ν , $\nu = 1, \dots, 5$ mit $a_5 := \kappa$. Die resultierenden Fehlerbahnen lauten

$$w^{(2)}(z) = \sum_{\nu=1}^5 w_{\nu\kappa} a_\nu \kappa \quad (4.71)$$

$$w^{(3)}(z) = \sum_{\nu=1}^5 \sum_{\mu=\nu}^5 \sum_{\tau=\mu}^5 w_{\nu\mu\kappa} a_\nu a_\mu a_\tau \quad . \quad (4.72)$$

Auf diese Weise treten im allgemeinen Fall fünf Farbfehler zweiten Ranges und 35 Bildfehler dritten Ranges auf. Behält man die Schreibweise analog zu Gleichung (3.121) bei, erhält man für den dritten Rang im allgemeinen Fall sogar 70 Fehlerkoeffizienten und muß noch die restlichen Terme aus Gleichung (3.76) verwalten. Die Ausdrücke für diese Koeffizienten wurden mittels eines Computer-Algebra-Programmes erstellt und durch einen Primzahl-Schlüssel eindeutig identifiziert. Dabei erhielt jeder Parameter a_ν eine Primzahl zugewiesen. Multipliziert man diese Primzahlen für jeden Koeffizienten getrennt nach Rang aus, läßt sich in einem FORTRAN-Programm zur Berechnung des Fehlerscheibchens einer elektronenoptischen Anordnung jeder Bildfehler zurückverfolgen, ohne für jeden der 70 Koeffizienten ein eigenes Unterprogramm manuell erstellen zu müssen. Ein C-Programm erzeugte dabei automatisch den Kopf der Unterprogramme (Variablenübergabe, Variablendeklaration) jedes Fehlerkoeffizienten aus der Ausgabe des Algebra-Programmes. Die Berechnung aller Bildfehler bis einschließlich dritten Ranges ist mit diesem Verfahren durchgeführt. Für Projektivsysteme ist ein solches Vorgehen, zumindest für Koeffizienten, die vorwiegend von a_3 , a_4 — dem Objektbereich — und der Farbabhängigkeit a_5 abhängen, wie in Kap. 2.2 beschrieben, notwendig.

Das zu berechnende Projektivsystem soll bezüglich seiner Akzeptanz gegenüber der Emitanz eines vorgeschalteten Energiefilters optimiert werden. Dazu muß jetzt die Rolle der Bildfehler untersucht werden.

Zunächst ist die Verzeichnung in einem Projektivsystem bei der elementspezifischen Abbildung zwar der dominante Bildfehler, allerdings verursacht sie keine Unschärfe des Bildes. Sie verursacht eine nichtlineare Verzerrung des Vergrößerungsmaßstabes; für Quadrupole sogar in jedem Schnitt verschieden. Für die Bildfehler dritter Ordnung existieren die vier Koeffizienten $w_{\gamma\gamma\gamma}$, $w_{\gamma\delta\delta}$, $w_{\delta\delta\delta}$ und $w_{\gamma\gamma\delta}$ für die Verzeichnung in der Bildebene. Nach [Rose 1999] lassen sich alle Verzeichnungskoeffizienten mit Hilfe von zusätzlichen Oktupolfeldern korrigieren. Da die Verzeichnungskoeffizienten keine Unschärfe des Bildes verursachen und die dominanten Bildfehler sind, werden sie einzeln berechnet und in % der Abweichung von der Detektorgröße angegeben. In Kap. 4.2 wird beschrieben, wie durch die Wahl der Quadrupolstärken im letzten Triplet die Verzeichnung beeinflußt werden kann.

Alle anderen Bildfehler verursachen eine Unschärfe des Bildes. In [Uhlemann 1996] wird die Akzeptanz durch einen dominanten Bildfehler bestimmt. Da in einem Projektivsystem aber mehrere Fehler dominant sein können, abhängig je nachdem welcher Objektbereich und welches Energiefenster genutzt wird, soll hier ein anderes Kriterium eingeführt werden. Jede Abweichung im xz - und yz -Schnitt der Summanden der Reihen (4.71) und (4.72) wird für ein maximales Objektfeld des Filters, eine maximale Apertur und das gewählte Energiefenster quadratisch gemittelt. Der größte Irrtum in dieser Rechnung wäre, wenn alle Bildfehler gleich groß wären. In diesem Fall ist der relative Fehler dieser Annahme $\sqrt{35}$. Das wird aber nie eintreten, da z. B. alle Öffnungsfehler vernachlässigbare Beiträge liefern. Eher tritt der Fall ein, in dem ein größter Bildfehler neben weiteren kleineren existiert. Das quadratisch gemittelte Fehlerscheibchen berücksichtigt dann alle relevanten Bildfehler und ist ein Kriterium für die übertragene Akzeptanz.

Damit wurde die Berechnung der Kaustik in der Endbildebene auf die Bestimmung der Verzeichnung in % und des quadratisch gemittelten Fehlerscheibchens reduziert. Auch für die zweite in diesem Kapitel diskutierte Abbildung des Energiespektrums läßt sich dieses Vorgehen anwenden. Dabei gilt als „Verzeichnung“ hier die Dispersion zweiten und dritten Ranges. Da bei einer solchen Abbildung als Information nur das Energiespektrum im xz -Schnitt interessant ist, werden nur die Fehlerabweichungen im xz -Schnitt für die quadratische Mittelung des Fehlerstreifens berücksichtigt. Die Bildfehler orthogonal zu dieser Richtung dürfen die Größe des Detektors nicht überschreiten, was ohne weiteres realisierbar ist.

In den bisherigen Ausführungen wurde eine Methode geschildert, mit der sehr schnell sehr viele verschiedene Systeme auf ihre Tauglichkeit untersucht werden können. Das quadratisch gemittelte Fehlerscheibchen wird dabei in der Endbildebene angegeben. Der Grund dafür ist eine vorgegebene Pixelgröße des verwendeten Detektors. Bei einer CCD-Kamera ist ein Pixel die Breite eines Kanals und bei einem Film die Korngröße. Das quadratisch gemittelte Fehlerscheibchen sollte nicht wesentlich größer als ein Pixel sein, um die Auflösung des gesamten Mikroskops nicht zu begrenzen. Ein auf diese Weise eingestelltes Projektiv berücksichtigt die maximale Emittanz der vorhergehenden Elemente. Eine weitere Möglichkeit besteht in der Angabe der Bildfehler in der Objektebene. Dazu muß die Vergrößerung des Projektivs und die Zwischenvergrößerung in Betracht gezogen werden. Dabei ergibt sich in etwa eine Gesamtvergrößerung in einem Bereich von $V = 10000 \dots 100000$. Eine Angabe des Fehlerscheibchens in μm in der Detektorebene läßt sich durch Division durch die Gesamtvergrößerung somit in nm in der Objektebene angeben und ergibt die erreichbare Auflösung des Elektronenmikroskops.

4.4 Auswahl des Projektionssystems

In den bisherigen Abschnitten wurden Verfahren zur Berechnung der Fundamentalbahnen und der Bildfehler von Quadrupol-Projektiv-Systemen geschildert. Wie aus der Argumentation hervorgeht, ist es durch die Vielzahl der denkbaren Abbildungen notwendig, nicht nur einen Bildfehler bzw. eine Abbildung zu optimieren, sondern die Akzeptanz des Projektivs. Nur dadurch läßt es sich erstens an unterschiedliche Energiefilter anpassen und zweitens ermöglicht es erst durch eine möglichst hohe Akzeptanz die Übertragung auch von Grenzbereichen. So sind auf diese Weise breite Energiefenster **und** große Objektbereiche sowohl für die elementspezifische Abbildung als auch für die Energie-Verlust-Spektroskopie realisierbar.

Wie sehr verkürzt dargestellt wurde, ist für die Akzeptanz das Produkt der Entwicklungsparameter a_ν , $\nu = 1 \dots 5$ wesentlich, oder in anderen Worten der Spurenraum aus [Rose 1995]. Genauer wäre eine Betrachtung des Phasenraumes der Orts- und Impulskoordinaten, wobei die letzteren durch die Auszeichnung der optischen Achse in Steigungen der Bahnen umgewandelt werden. Durch die Einführung der optischen Achse sind Ort und Impuls in z -Richtung für den Phasenraum ohne Bedeutung, es sei denn man führt ein Energiefilter mit Dispersion und damit Energieabhängigkeit ein. In dieser Arbeit wird deshalb zusätzlich zu

den Ortskoordinaten und Steigungen im xz - und yz -Schnitt noch die relative Energieabweichung κ der Elektronen, oder anders gesagt der Impuls in z -Richtung, in der Akzeptanz berücksichtigt. Demzufolge läßt sich festhalten, daß eine Minimierung der Auslenkungen der Fundamentalbahnen für den ersten Rang gleichbedeutend mit der Maximierung der Akzeptanz ist. Außerdem wurde schon betont, daß eine Quadrupolanordnung mit festen Hauptschnitten der Felder eine Optimierung der zweidimensionalen Akzeptanz zuläßt und damit optimal auf die Problemstellung angepaßt ist. Auf jede Fundamentalbahn lassen sich so geeignete Gewichte mit Namen a_ν festlegen, die genau die Verhältnisse beschreiben, die durch die Zwischenvergrößerung des Mikroskops festgelegt werden. Im Projektiv sind die axialen Fundamentalbahnen sehr stark verkleinert, so daß hier sehr viel größere Gewichte a_ν mit $\nu = 1, 2$ zugelassen werden können, als für die stark vergrößerten Feldbahnen mit a_ν , $\nu = 3, 4$. Desweiteren läßt sich gerade für Quadrupolsysteme im xz -Schnitt die Akzeptanz für eine möglichst große Dispersion optimieren. Für ein optimales Projektivsystem wird man somit generell minimale Auslenkungen der Fundamentalbahnen fordern.

Die Kriterien für die Auswahl eines optimalen Projektivsystems wurden auf folgende Art und Weise getroffen. Zunächst wurde die Bitriplett-Anordnung für die erster Ordnung stigmatische, verzeichnungsfreie Abbildung untersucht. Da die normierten Quadrupolstärken in Kap. 4.2 alle festgelegt wurden, sollen nun durch die Berechnung sehr vieler Systeme die optimalen Geometrieparameter bestimmt werden. Aus Gründen der Rechengeschwindigkeit wurde diese Rechnung in der SCOFF-Näherung ausgeführt. Die freien Geometrieparameter sind der Abstand des ersten Quadrupoles von der achromatischen Bildebene g , der Abstand der beiden Triplets t , der Abstand der Quadrupole a_1 und a_2 innerhalb der Triplets, die Breite der Quadrupole b_i mit $i = 1, \dots, 6$ und der Abstand des letzten Quadrupoles zur Endbildebene b . Aus Symmetriegründen wurde dabei innerhalb eines Triplets der Abstand zwischen den Quadrupolen und die Breite der Quadrupole jeweils gleich groß gewählt. Begrenzend für die elementspezifische Abbildung ist die Lage des Energieselektionsschlitzes, da vor dieser Ebene kein Quadrupol auftreten darf. Die Länge g ist somit eingeschränkt. Um eine unnötig lange Mikroskopsäule zu vermeiden, muß die Gesamtlänge des Projektivs aus bautechnischen Gründen auf maximal $h = 648.5$ mm [LEO] eingeschränkt werden. Da zwischen den Quadrupolen Feldblenden zur Begrenzung des Randfeldes vorgesehen sind und außerdem ausreichend Platz für die stromführenden Wicklungen verbleiben muß, durften die Abstände der Quadrupole a_i und t nicht kleiner als 10 mm werden. Aus dem gleichen Grund wurde dieser Abstand auch als minimale Entfernung des Energieselektionsschlitzes zum ersten Quadrupol angesetzt. Diese Festlegungen ergaben den zu durchsuchenden Parameterraum. Als Vergrößerung wurde dabei eine typische Projektivvergrößerung $V = 120$ in einem TEM gewählt.

Kriterien für ein brauchbares System waren in erster Linie ein kleines Fehlerscheibchen und eine geringe Verzeichnung. Beide Größen wurden wie in Kap. 4.3 geschildert berechnet. Die Akzeptanz der Anordnung wurde durch die Einstellung des letzten Quadrupoles im Brechkraftmaximum, wie in Kap. 4.2 beschrieben, optimiert. Dies ergab zugleich günstige Werte für die Verzeichnung.

Ein weiteres Kriterium für eine realisierbare elementspezifische Abbildung waren die Mini-

mierung der erforderlichen normierten Quadrupolstärken. Wie Kap. 3.5.1 definiert, erreicht man minimale Feldstärken bzw. nach Kap. 3.4.3 minimale Ampèrewindungen, indem die Breite des jeweiligen Quadrupoles vergrößert wird. Minimale Ampèrewindungen sind aus den folgenden Gründen wichtig. Zunächst entsteht dadurch wenig Wärme und es läßt sich eine gesonderte Kühlung der Polschuhe vermeiden. Außerdem tritt keine magnetische Sättigung der Polschuhe auf, was die Berechnung der Felder und den Bau des Multipoles erleichtert. Weiterhin sollte berücksichtigt werden, daß für das Projektivsystem höhere Vergrößerungen als die hier eingestellte möglich sein sollten. Dies führt aber vorallem im letzten Quadrupol zu höheren Feldstärken, so daß durch die Minimierung der Ampèrewindungen hohe Vergrößerungen realisierbar bleiben. Die heutigen Energiefilter sind nicht nur für die hier angenommene Säulenspannung von $U = 200$ kV ausgelegt. Genausogut sollen sie auch in Mikroskopen mit $U = 400$ kV einsetzbar sein. In der paraxialen Differentialgleichung (3.35) bestimmt der Quotient aus der Quadrupolfeldstärke und dem modifizierten elektrischen Potential die resultierende Brechkraft. Dem entsprechend muß bei Erhöhung der Säulenspannung auch die Quadrupolstärke erhöht werden. Höhere Säulenspannungen werden durch die Minimierung der Ampèrewindungen somit auch ermöglicht. Durch die erwähnte Skalierbarkeit der Quadrupolstärken mit der Säulenspannung werden in dieser Arbeit ohne Beschränkung der Allgemeinheit alle Rechnungen bei der Säulenspannung $U = 200$ kV ausgeführt. Zuletzt soll noch erwähnt werden, daß niedrige Feldstärken im Allgemeinen auch niedrige Bildfehlerkoeffizienten bewirken.

Aus mehreren möglichen Systemen die diese Berechnungen ergaben wird in Kap. 4.6 eines vorgestellt werden. Dazu werden Ampèrewindungen, Vergrößerungsbereich und Bildfehler diskutiert.

Ausgehend von dieser Wahl der Geometrie soll danach die Übertragung des Energiespektrums optimiert werden. Die Berechnung der Quadrupolbrechkkräfte erfolgt wie in Kap. 4.2 beschrieben zuerst durch die Näherung mit dünnen Quadrupolen und dann in SCOFF-Näherung. Die Vielzahl der erhaltenen Systeme entlang der berechneten Lösungskurve werden zunächst nach ihren paraxialen Eigenschaft beurteilt. Wie in einem vorigen Absatz dieses Kapitels geschildert, dienen die Entwicklungsparameter a_ν als Gewichte zur Beurteilung der Akzeptanz. Die Abbildung soll eine variable Vergrößerung gewährleisten, da damit die Übertragung von variablen Energiefenstern in die Detektorebene möglich ist. Für jedes Energiefenster muß die Berechnung des Lösungsraumes erneut erfolgen. In diesem Fall geschieht dies für die in Kap. 2 motivierten Energiefenster von $\Delta E = 60, 200, 300, 500$ eV. Der Einfluß der dispersiven Bahn auf die Akzeptanz und die Farbfehler wird für Energiefenster von 60 eV gering sein; für Energiefenster von 500 eV wird er alles andere dominieren. Dem entsprechend werden im einen Fall sehr viele Systeme zur Lösungsmenge und damit zur Minimierung der Bildfehler zur Verfügung stehen, während im anderen Fall die Auswahl sehr gering sein wird. Für die durch dieses Vorgehen erhaltenen Systeme werden nun die gleichen Kriterien angewandt wie bei der elementspezifischen Abbildung. Das Fehlerscheibchen, genau wie die Dispersion zweiten und dritten Grades, die in diesem Fall als „Verzeichnung“ angesehen werden, wird im Lösungsraum so klein wie möglich gewählt. Die Ampèrewindungen sind in diesem Fall durch die kleinere erforderliche Vergrößerung generell niedriger

als bei der elementspezifischen Abbildung, so daß dieses Kriterium den Lösungsraum nicht weiter einschränkt.

Die Verwendung der SCOFF-Näherung ermöglicht durch die schnelle Berechnung der Fundamentalbahnen erst die hier erforderliche Untersuchung von sehr vielen Systemen. Beispiele von Systemen für die Übertragung verschiedener Energiefenster finden sich in Kap. 4.6.

4.5 Berücksichtigung des Randfeldes

Bisher wurden die Fundamentalbahnen nur innerhalb der SCOFF-Näherung sowohl für die elementspezifische Abbildung als auch die Übertragung des Energiespektrums berechnet. Da diese Näherung natürlich keiner realistischen Lösung der Laplace-Gleichung entspricht, sondern nur der Erleichterung der Berechnung der Fundamentalbahnen dient, sollen an dieser Stelle jetzt die Felder aus Kap. 3.4.1 zur Berechnung der Fundamentalbahnen herangezogen werden. Die paraxiale Differentialgleichung (3.35) läßt sich in diesem Fall nicht mehr analytisch lösen. Zur numerischen Lösung kommt ein eingebettetes Runge–Kutta Verfahren vierter und fünfter Ordnung von Dormand und Prince [Spellucci 1990] mit Schrittweitensteuerung zur Anwendung. Dieses Verfahren löst nur gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung

$$\mathbf{u}' = \mathbf{f}(x, \mathbf{u}) \quad . \quad (4.73)$$

Allerdings läßt sich jede gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$\mathbf{y}'' = \mathbf{g}(x, \mathbf{y}, \mathbf{y}') \quad (4.74)$$

in eine erster Ordnung umwandeln, sofern man die Dimension der zu berechnenden vektorwertigen Funktion erhöht. Dabei werden die zusätzlichen zu bestimmenden Funktionen als die Ableitungen der ursprünglich zu bestimmenden Funktion definiert

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{y}' \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \end{pmatrix} \quad . \quad (4.75)$$

Damit ergibt sich die neue Differentialgleichung erster Ordnung

$$\mathbf{u}' = \begin{pmatrix} \mathbf{y}' \\ \mathbf{y}'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_2 \\ \mathbf{g}(x, \mathbf{u}) \end{pmatrix} := \mathbf{F}(x, \mathbf{u}) \quad , \quad (4.76)$$

die sich jetzt mit dem angegebenen Runge–Kutta–Verfahren lösen läßt. Die paraxiale Bahngleichung (3.35) ist durch die Anwendung dieser Gleichungen numerisch zu lösen.

In einem ersten Schritt wird das Spalt–Bohrungs Verhältnis der Quadrupole so angepaßt, daß die Fundamentalbahnen sich in der SCOFF-Näherung und der realistischen Felder in etwa gleich verhalten. Dabei ergab sich, daß die Länge der Polschuhe addiert mit der Länge

des Spalts zwischen den Polschuhen aus **Abb. 3.3** etwas größer als die Länge des SCOFF-Feldes sein sollte. Konkret wurde für die in SCOFF-Näherung 15 mm langen Quadrupole des ersten Triplets eine Polschuhlänge von 11 mm und für die in SCOFF-Näherung 20 mm langen Quadrupole des zweiten Triplets eine Polschuhlänge von 16 mm angenommen. Die Spaltbreite zwischen den Polschuhen wurde generell zu 5 mm gewählt. Die Wahl dieser Geometrie der Multipole ist nur eine mögliche von vielen.

Zur Fokussierung der Fundamentalbahnen mit realistischen Feldern wird ein mehrdimensionales Quasi-Newton-Verfahren verwendet. Die Jacobi-Matrix wird durch Differenzenquotienten bestimmt. Als Startwerte dienen die optimierten Lösungen der SCOFF-Näherung. Neben den Bedingungen zur Fokussierung und Einstellung der richtigen Vergrößerung in der Endbildebene, wurden die weiteren Quadrupolfeldstärken dazu verwendet, den Verlauf der Fundamentalbahnen möglichst eng an dem der Lösungen der SCOFF-Näherung zu halten. Dazu werden weitere Bedingungen in einer beliebigen Zwischenebene, wie Nullstellen von Fundamentalbahnen in der SCOFF-Lösung oder parallele Austrittssteigungen der axialen Bahnen hinter dem ersten Triplet gewählt. Um die Rechnungen zu beschleunigen wurde zuerst mit einem einfacheren Randfeldmodell vorfokussiert. Dazu wurde in der Reihendarstellung (3.87), (3.88) und (3.89) für die Quadrupolfelder jeweils nur die erste Nullstelle der Besselfunktion $J_2(j_{2n} \rho/R)$ verwendet. Dabei läßt sich ein Feldmodell mit Hilfe der Funktion $\tanh(x)$ herleiten, daß auf [Lenz 1950] zurückgeht, der eine Näherung auf diese Weise für Rundlinsen durchgeführt hat. Die für das Runge-Kutta-Verfahren notwendige Auswertung der Potentiale wird so stark beschleunigt. Nach der Vorfokussierung verwendet man dann das vollständige Feldmodell (3.87), (3.88) und (3.89). Da die Fokussierung der Bahnen jetzt schon sehr gut ist, gelangt man schnell zum Ziel.

Die nach dieser Methode berechneten Fundamentalbahnen mit realistischem Randfeld stimmen sehr gut mit den SCOFF-Lösungen überein. Die benötigten Ampèrewindungen ändern sich in einem Bereich von maximal $\pm 10\%$.

4.6 Ergebnisse

Parameter	g	a_1	a_2	$d_1 \dots d_3$	$d_4 \dots d_6$	t	b_{CCD}	b_{Film}
Länge [mm]	75	10	10	15	20	35	393.5	314

Tabelle 4.1: Die Geometrieparameter für ein ausgewähltes Projektivsystem in SCOFF-Näherung.

Nach dem alle Methoden zur Berechnung von Quadrupolsystemen besprochen sind, soll jetzt ein System vorgestellt werden, daß sich aus den oben beschriebenen Optimierungen ergab. Die Längen wurden wie in **Tab. 4.1** gewählt. Mit dieser Geometrie wurden sowohl

die elementspezifische Abbildung als auch die Übertragung des Energieverlust-Spektrums berechnet und damit für beide Abbildungen die gleichen Quadrupole verwendet.

Die Geometrieparameter in **Tab. 4.1** sind größtenteils schon definiert worden. Die Längenangaben für die Quadrupole gelten hier für die SCOFF-Näherung. Die Länge g bedeutet den Abstand der achromatischen Bildebene zum Beginn des ersten Quadrupoles, a_i die Abstände der Quadrupole innerhalb der Tripletts, d_i die Breite der sechs Quadrupole, t den Abstand der beiden Tripletts und b_{CCD} bzw. b_{Film} jeweils den Abstand des letzten Quadrupoles zur Lage der CCD-Kamera bzw. zur Lage des Schirmes.

4.6.1 Die elementspezifische Abbildung

Zunächst werden die Ergebnisse von dem System aus **Tab. 4.1** für die elementspezifische Abbildung geschildert. Zwei Systeme werden hier betrachtet. Zunächst ein System für einen Bereich mit hoher Vergrößerung, für das diese Geometrie bei der Vergrößerung $V = 120$ optimiert wurde, und dann ein System mit einem Bereich niedrigerer Vergrößerungen ($V < 60$).

Die Fundamentalbahnen sind für die SCOFF-Näherung in **Abb. 4.13** und für die genauere Randfeldrechnung in **Abb. 4.14** für den Bereich hoher Vergrößerung dargestellt. Man erkennt, daß sich der Verlauf der Fundamentalbahnen beim Übergang zu den realistischen Feldern nicht wesentlich ändert, was auf die geschilderte Berechnungsmethode zurückzuführen ist. Die Stärken der Felder sind nur qualitativ eingezeichnet. Die genauen Stärken der Quadrupole werden gesondert in **Abb. 4.17** angegeben.

Ampèrewindungen [A] in SCOFF-Näherung	Ampèrewindungen [A] für die Randfeldrechnung
25.415	25.052
-42.411	-42.068
28.066	27.764
0.040	0.036
-105.436	-97.949
79.640	82.000

Tabelle 4.2: Vergleich der Ampèrewindungen für die stigmatische Abbildung mit Vergrößerung $V = 120$ in SCOFF-Näherung und bei Berücksichtigung des Randfeldeinflusses.

Zum Vergleich der SCOFF-Näherung mit der Randfeldrechnung werden noch die Ampèrewindungen für die Vergrößerung $V = 120$ in der **Tab. 4.2** aufgeführt. Die Resultate der

Paraxiale Bahnen bei der elementspezifischen Abbildung (ESI) - Vergrößerung 120

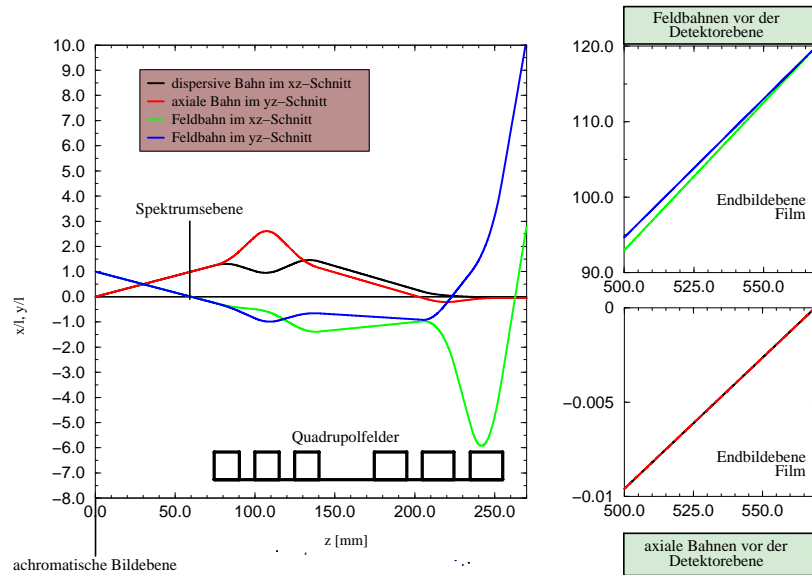


Abbildung 4.13: Die Fundamentalbahnen in SCOFF-Näherung für eine stigmatische Abbildung mit Vergrößerung $V = 120$.

Paraxiale Bahnen bei der elementspezifischen Abbildung (ESI) - Vergrößerung 120

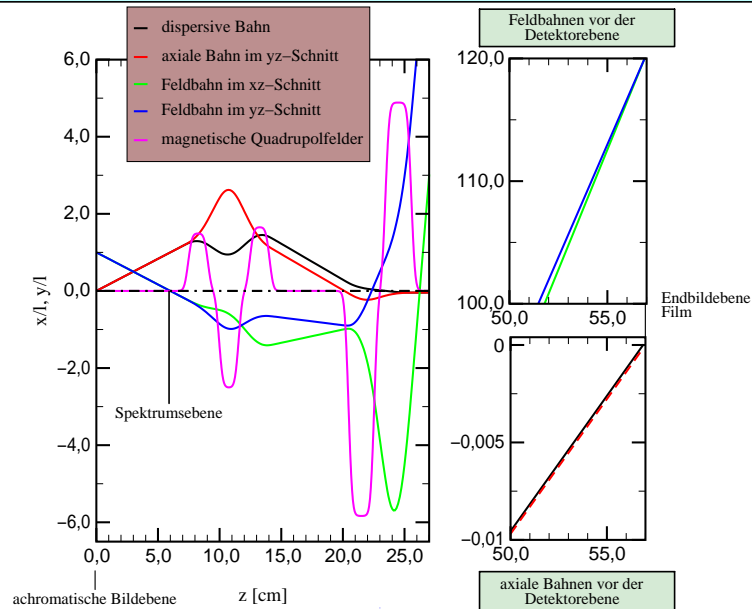


Abbildung 4.14: Die Fundamentalbahnen mit Berücksichtigung ausgedehnter Randfelder für eine stigmatische Abbildung mit Vergrößerung $V = 120$.

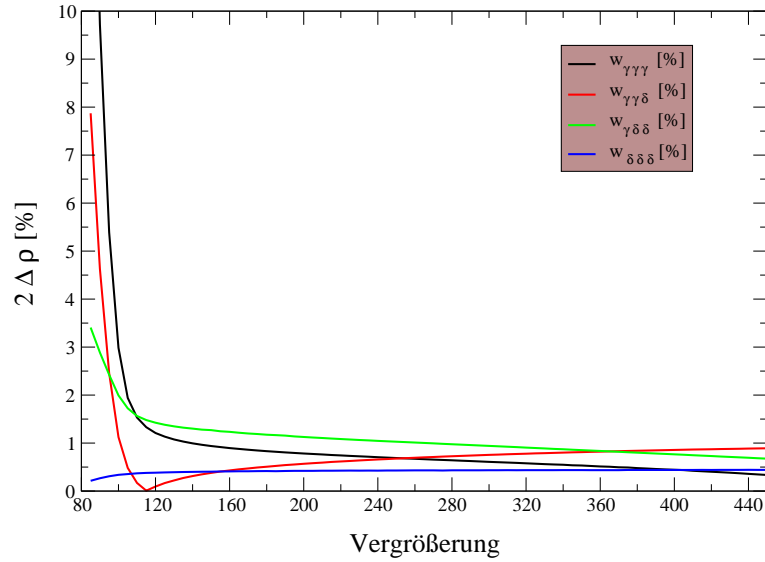


Abbildung 4.15: Die Fehlerkoeffizienten der Verzeichnung in Abhängigkeit der Vergrößerung für die elementspezifische Abbildung bei hoher Vergrößerung.

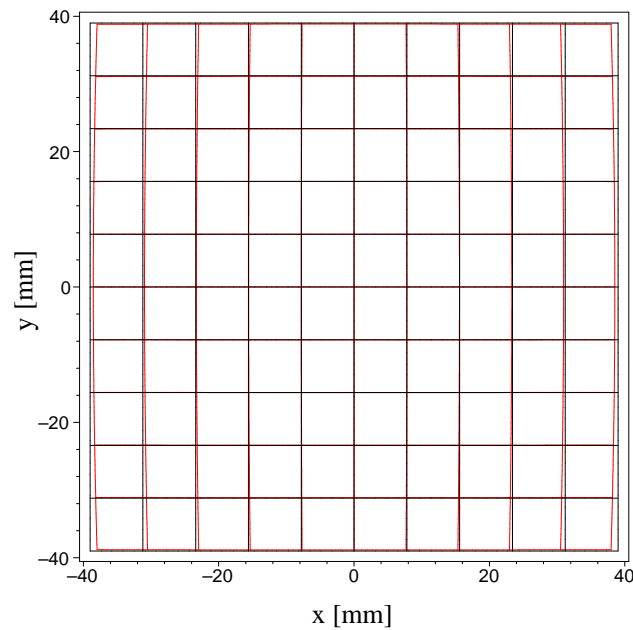


Abbildung 4.16: Die Verzeichnung in der xy -Fildebene für eine Vergrößerung von $V = 120$. Die relative Abweichung ist kleiner als 1.4%.

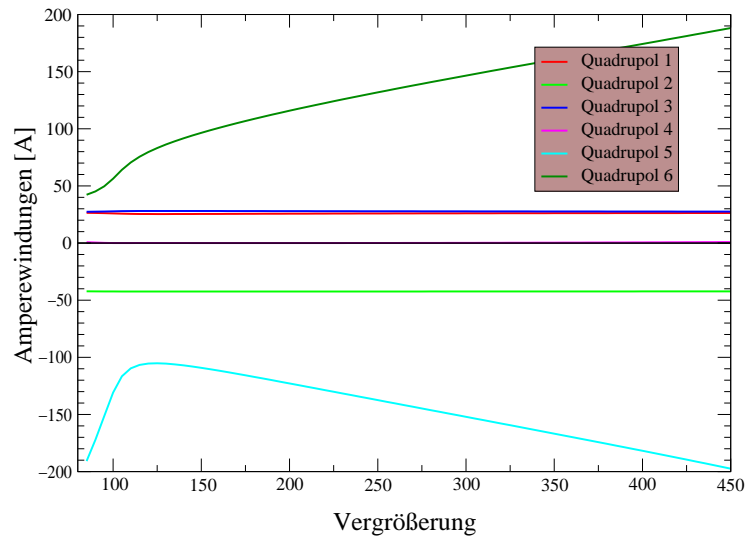


Abbildung 4.17: Die Ampèrewindungen der Quadrupole in Abhängigkeit der Vergrößerung für die elementspezifische Abbildung bei hoher Vergrößerung für die SCOFF-Näherung.

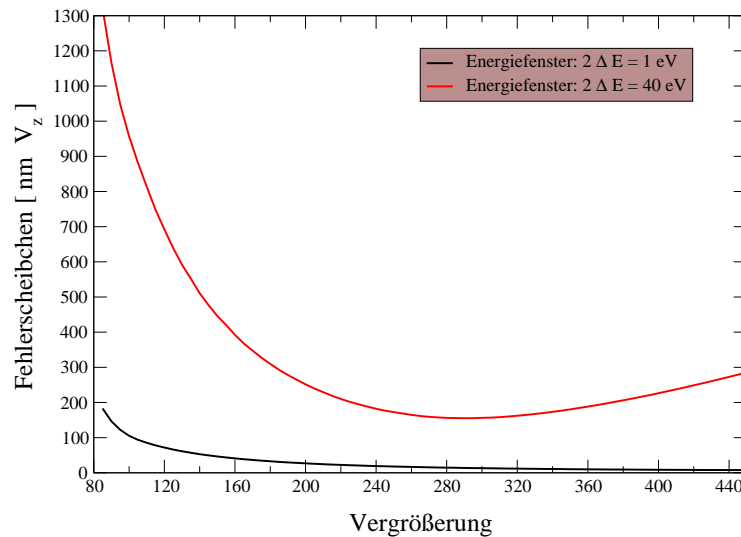


Abbildung 4.18: Das quadratisch gemittelte Fehlerscheibchen in Abhängigkeit der Vergrößerung für die elementspezifische Abbildung bei hoher Vergrößerung in der achromatischen Bildebene. Die Zwischenvergrößerung liegt etwa im Bereich von $V_z = 100 \dots 1000$.

beiden Näherungen unterscheiden sich um maximal 10%.

Man erkennt in **Abb. 4.17**, daß im hier untersuchten Fall der vierte Quadrupol der Bitriplett-Anordnung nahezu ausgeschaltet ist. Die maximale Brechkraft ist in den letzten beiden Quadrupolen eingestellt, was genau die Methode der Lösungsfindung aus Kap. 4.2 widerspiegelt. Im wesentlichen beschränkt man damit die Auslenkungen der Feldbahnen im letzten Triplet und maximiert die Akzeptanz, bzw. das übertragbare Bildfeld. Diese Einstellung hat auch eine geringe Verzeichnung des Endbildes zur Folge. In **Abb. 4.15** sind alle vier Verzeichnungskoeffizienten dritter Ordnung aufgetragen. Die Verzeichnung des Endbildes bleibt für hohe Vergrößerungen unter einem Prozent des gesamten Bildfeldes, für Vergrößerungen $V \geq 120$ läßt sie sich kleiner als 1.4% einstellen. Im Vergleich zu Rundlinsen Projektivsystemen [Gerheim 1993] sind dies hervorragende Werte. Zur Illustration ist für den Fall der 120-fachen Vergrößerung in **Abb. 4.16** ein Gitter auf einen quadratischen Film von 80 mm Breite abgebildet. Das schwarze Gitter würde eine ideale Abbildung bedeuten, das rote Gitter gibt den realistischen Fall an. Betrachtet man nur den inneren Bereich und ein halb so großes Bildfeld, ist keine Verzeichnung des Bildes mehr zu erkennen. Dieser Fall entspricht einer 2048^2 CCD-Kamera als verwendeten Detektor.

Alle eine Unschärfe des Bildes bewirkenden Bildfehler werden in einem quadratisch gemittelten Fehlerscheibchen zusammengefaßt (Kap. 4.3). In der **Abb. 4.18** ist zu erkennen, daß für hohe Zwischenvergrößerungen und einer Abbildung von am Objekt elastisch gestreuten Elektronen ($\Delta E < 1\text{eV}$) eine sub-Å Auflösung des Objektes möglich ist. Das Projektiv beschränkt demnach nicht die Auflösung eines Öffnungsfehler korrigierten Mikroskops. Auch für die elementspezifische Abbildung sind hinreichend große Energiefenster des Filters übertragbar. Eine Korrektur einiger Bildfehlerkoeffizienten würde demnach nur die Anzahl der erforderlichen Felder erhöhen.

Das erneute Ansteigen der Kurve für große Energiefenster in **Abb. 4.18** läßt sich durch die **Abb. 4.19** und **Abb. 4.20** begründen. In diesen Abbildungen wird die Größe und der Index des dominanten Bildfehlers in Abhängigkeit der Vergrößerung dargestellt. Offenbar trägt ab einer Vergrößerung von etwa 310 die Dispersion dritten Ranges dominant zum Fehlerscheibchen bei, was den leichten Knick in der Kurve in **Abb. 4.19** erklärt. Dieser Bildfehler wird durch die Vergrößerung des Mikroskops nicht beeinflusst. Für kleinere Vergrößerungen dominiert der Bildfehler $w_{\gamma\delta\kappa}$. Für kleine Energiefenster sind die Bildfehler der Bildfeldwölbung und des Astigmatismus dritter Ordnung am größten.

Für eine Beurteilung des quadratisch gemittelten Fehlerscheibchens wurde die gesamte Fehlerfigur bis einschließlich der Bildfehler dritter Ordnung untersucht. Dazu wurden für jeden Objektpunkt Kreise mit verschiedenen Radien in der Aperturebene und verschiedene Energiefenster in der Energieselektionsebene in die Endbildebene abgebildet und überlagert. Für die verschiedenen Energiefenster müßte für eine korrekte Kaustikfigur in der Endbildebene dafür die Intensitätsverteilung des Energiespektrums berücksichtigt werden. Genauso wird die Aperturebene keine Gleichverteilung der Intensität aufweisen. Aus diesem Grund wurde für alle diese Parameter eine Normalverteilung angenommen und ein Intervall der Größe

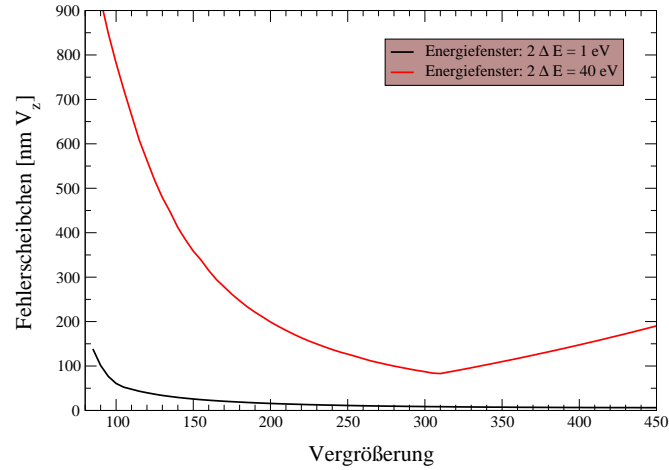


Abbildung 4.19: Der größte auftretende Fehlerkoeffizient in Abhängigkeit der Vergrößerung für die elementspezifische Abbildung bei hoher Vergrößerung in der achromatischen Bildebene. Die Zwischenvergrößerung liegt etwa im Bereich von $V_z = 100 \dots 1000$.

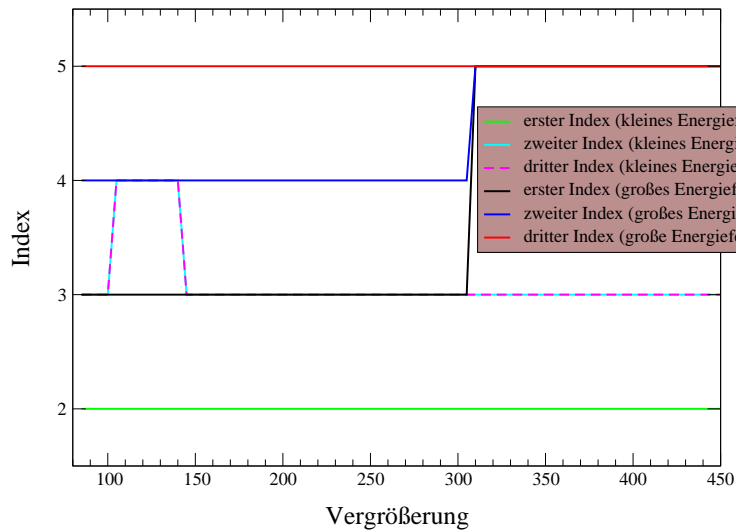


Abbildung 4.20: Der Index des größten auftretenden Fehlerkoeffizienten in Abhängigkeit der Vergrößerung für die elementspezifische Abbildung bei hoher Vergrößerung. Bis zu einer Vergrößerung von $V = 310$ ist nach der bisherigen Notation der Fehler $w_{\gamma\delta\kappa}$ dominant für das große Energiefenster von $2\Delta E = 40$ eV.

Fehlerkoeffizient	Größe normiert auf l	Fehlerkoeffizient	Größe normiert auf l
$w_{\alpha\kappa}$	268.3	$w_{\beta\beta\beta}$	$-61338i$
$w_{\beta\kappa}$	$782.9i$	$w_{\beta\beta\gamma}$	24921.4
$w_{\gamma\kappa}$	-32.1	$w_{\beta\beta\delta}$	$69516.8i$
$w_{\delta\kappa}$	$-169.0i$	$w_{\beta\beta\kappa}$	-806574.8
$w_{\kappa\kappa}$	5545.8	$w_{\beta\gamma\gamma}$	$-26607.1i$
$w_{\alpha\alpha\alpha}$	-5019.9	$w_{\beta\gamma\delta}$	-18570.2
$w_{\alpha\alpha\beta}$	$-39027.8i$	$w_{\beta\gamma\kappa}$	$1030084.8i$
$w_{\alpha\alpha\gamma}$	10326.3	$w_{\beta\delta\delta}$	$-27137.5i$
$w_{\alpha\alpha\delta}$	$14846.4i$	$w_{\beta\delta\kappa}$	613653.2
$w_{\alpha\alpha\kappa}$	-311240.3	$w_{\beta\kappa\kappa}$	$-3164200.0i$
$w_{\alpha\beta\beta}$	-39027.8	$w_{\gamma\gamma\gamma}$	-49470.6
$w_{\alpha\beta\gamma}$	$49824.8i$	$w_{\gamma\gamma\delta}$	$-3879.6i$
$w_{\alpha\beta\delta}$	29692.9	$w_{\gamma\gamma\kappa}$	-194583
$w_{\alpha\beta\kappa}$	$-1613149.5i$	$w_{\gamma\delta\delta}$	-58262.6
$w_{\alpha\gamma\gamma}$	-9415.3	$w_{\gamma\delta\kappa}$	$-383783.8i$
$w_{\alpha\gamma\delta}$	$-18570.2i$	$w_{\gamma\kappa\kappa}$	4675146.6
$w_{\alpha\gamma\kappa}$	426819.2	$w_{\delta\delta\delta}$	-15680.5i
$w_{\alpha\delta\delta}$	-6647.0	$w_{\delta\delta\kappa}$	-137370.7
$w_{\alpha\delta\kappa}$	$613653.2i$	$w_{\delta\kappa\kappa}$	$4609748.3i$
$w_{\alpha\kappa\kappa}$	-4736838.3	$w_{\kappa\kappa\kappa}$	-9275520.0

Tabelle 4.3: Die Fehlerkoeffizienten für eine Vergrößerung von $V = 120$ bei einer stigmatischen Abbildung.

einer Standardabweichung (66%) berücksichtigt. Berechnet man unter diesen Voraussetzungen die Kaustik in der Endbildebene, ergeben sich Fehlerscheibchen in etwa von der Größe des quadratisch gemittelten Fehlerscheibchens. Damit hat sich dieses Verfahren als sehr schnell und als eine gute Näherung des realistischen Fehlerscheibchens erwiesen. Abschließend werden für den stigmatischen Fall der hohen Vergrößerung in **Tab. 4.3** noch die Fehlerkoeffizienten für die Vergrößerung $V = 120$ angegeben. Aufgrund der Zweischnitts-symmetrie der Felder sind die Koeffizienten entweder rein reell oder rein imaginär.

Für die elementspezifische Abbildung bei großem Energiefenster, bzw. für die Abbildung elastisch gestreuter Elektronen ($\Delta E < 1\text{eV}$), wurde noch eine zweite Projektiveinstellung mit niedrigerer Vergrößerung untersucht. Da diese Einstellung für das gleiche Projektiv gelten soll, werden in diesem Fall nur die Quadrupolstärken bzw. die Ampèrewindungen für die Fokussierung verändert. Die Geometrie bleibt die gleiche wie in **Tab. 4.1**. Wie in Kap. 4.2 dargestellt sind ja für jede Vergrößerung mehrere Lösungen möglich, da durch den überzähligen Quadrupol die Fundamentalbahnen für die gleiche Abbildung unterschiedlich eingestellt werden können. Eine solche Abbildung mit geringer Vergrößerung soll ein möglichst großes Bildfeld übertragen können und nicht unbedingt eine hohe Auflösung liefern. Eine Berechnung des Vergrößerungsbereiches **Abb. 4.21** ergibt im Unterschied zu den hohen Vergrößerungen eine maximale Brechkraft des letzten Quadrupoles und eine zwar immer noch geringe Anspannung des vierten Quadrupoles, allerdings ist sie jetzt vor allem für sehr kleine Vergrößerungen deutlich größer Null.

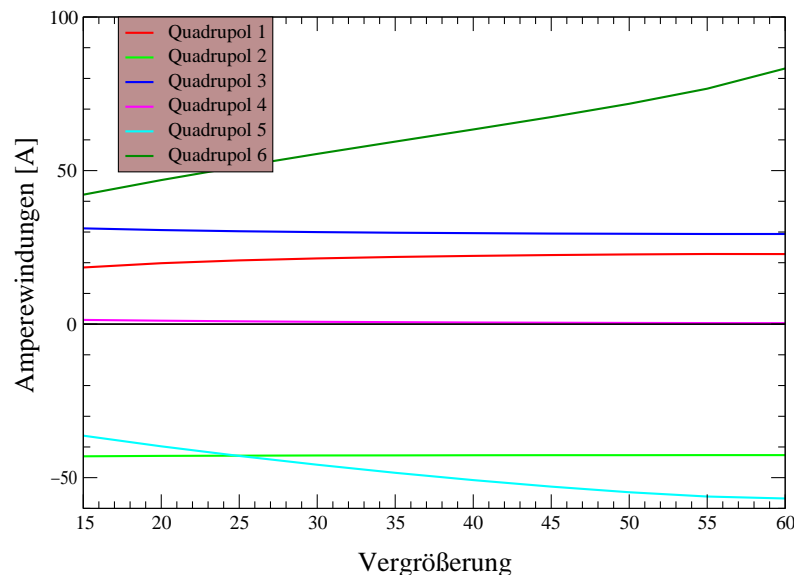


Abbildung 4.21: Die Ampèrewindungen der Quadrupole in Abhängigkeit der Vergrößerung für die elementspezifische Abbildung bei niedriger Vergrößerung.

Paraxiale Bahnen bei der elementspezifischen Abbildung (ESI) - Vergrößerung 60

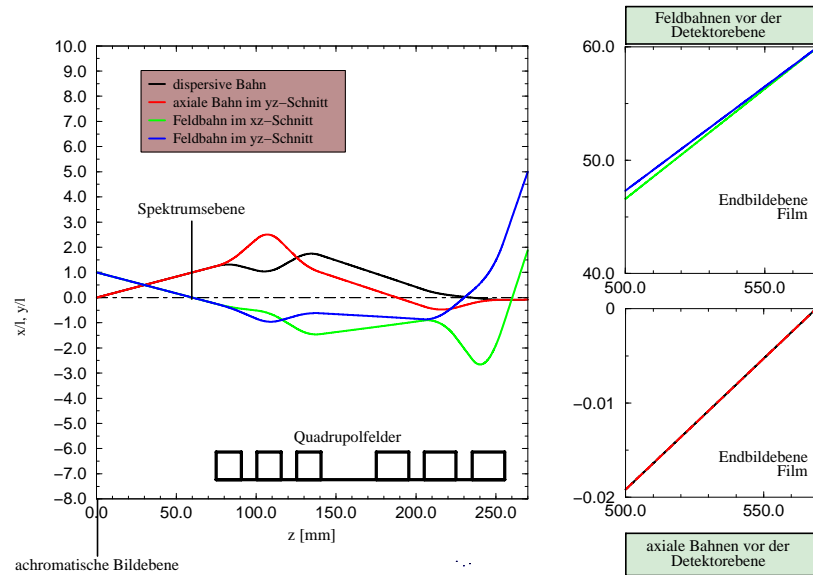


Abbildung 4.22: Die Fundamentalbahnen in SCOFF-Näherung für eine stigmatische Abbildung mit Vergrößerung $V = 60$.

Paraxiale Bahnen bei der elementspezifischen Abbildung (ESI) - Vergrößerung 60

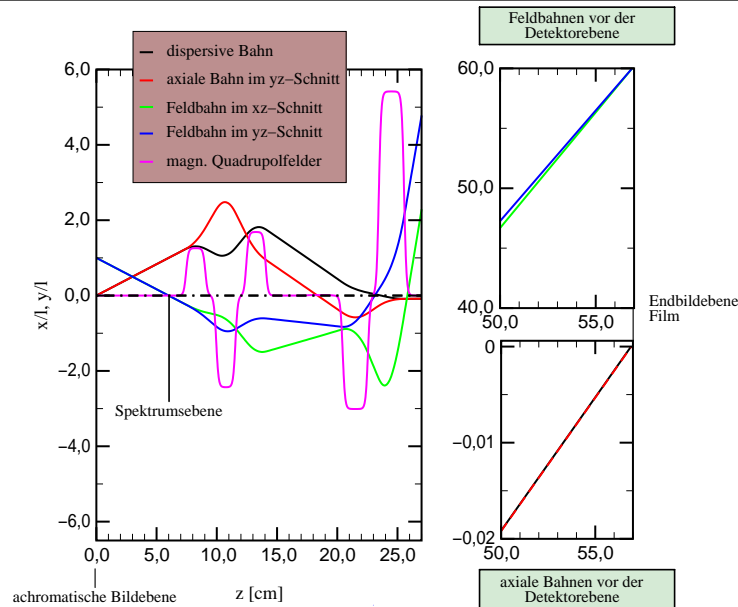


Abbildung 4.23: Die Fundamentalbahnen mit Berücksichtigung ausgedehnter Randfelder für eine stigmatische Abbildung mit Vergrößerung $V = 60$.

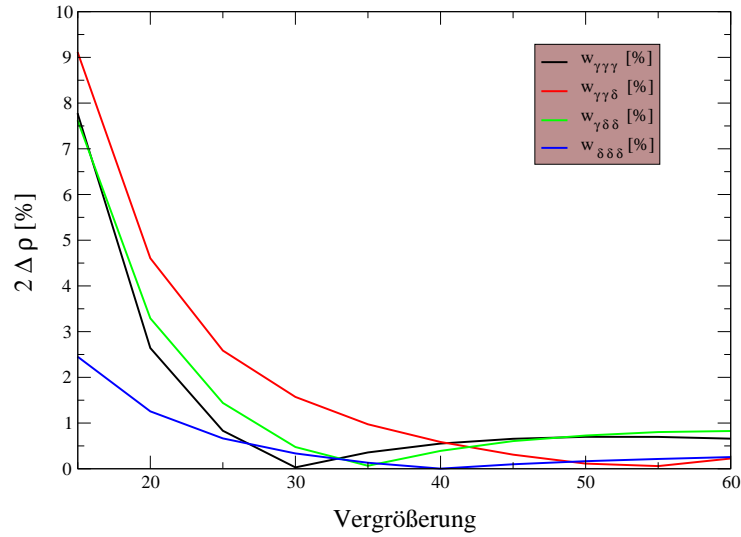


Abbildung 4.24: Die Fehlerkoeffizienten der Verzeichnung in Abhängigkeit der Vergrößerung für die elementspezifische Abbildung bei niedriger Vergrößerung.

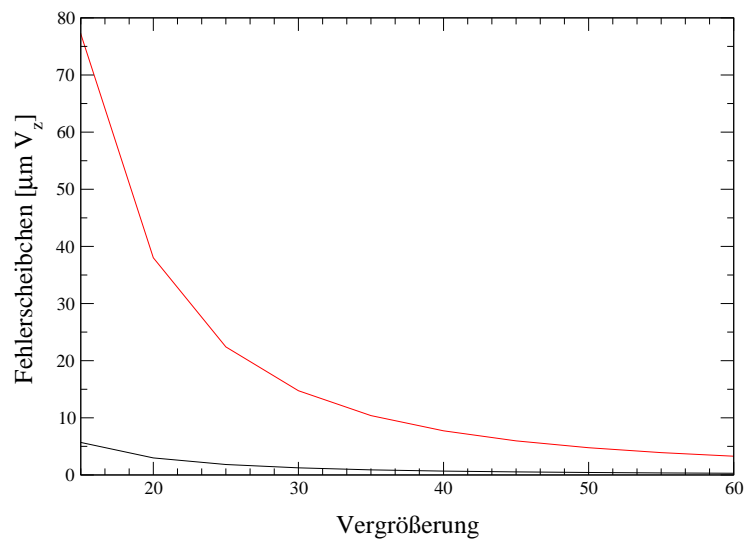


Abbildung 4.25: Das quadratisch gemittelte Fehlerscheibchen in Abhängigkeit der Vergrößerung für die elementspezifische Abbildung bei niedriger Vergrößerung in der achromatischen Bildebene. Die Zwischenvergrößerung liegt etwa im Bereich von $V_z = 100 \dots 1000$.

Die Fundamentalbahnen für 60-fache Vergrößerung in SCOFF-Näherung in **Abb. 4.22** und in der Randfeldrechnung **Abb. 4.23** unterscheiden sich kaum. Auch für die Ampèrewindungen gilt wie für die hohen Vergrößerungen, daß die relativen Unterschiede im Bereich von 10% liegen. Hier gelten die gleichen Bedingungen wie für die hohen Vergrößerungen. Auch die Verzeichnungskoeffizienten aus **Abb. 4.24** lassen sich in diesem Bereich unter 1% einstellen. Für Vergrößerungen $V < 35$ muß unter den verschieden möglich wählbaren Lösungen eine solche eingestellt werden, so daß auch dann die Verzeichnung möglichst klein wird. Diese Optimierung läßt sich, wie in Kap. 4.2 dargestellt, durch eine Maximierung der Brechkraft der letzten beiden Quadrupole immer finden.

Die Bildfehler, die eine Unschärfe der Abbildung verursachen, werden in diesem Fall in **Abb. 4.25** dargestellt. Die resultierende Auflösung ist für diese Vergrößerung ausreichend. In jedem Fall lassen sich für Vergrößerungen $V < 60$ noch andere Lösungen finden, die kleinere Fehlerscheibchen zulassen. Der Lösungsbereich ist in diesem Fall für $V = 60$ berechnet. Für solche niedrigen Vergrößerungen ist die Übertragung eines Übersichtsgebietes, mit anderen Worten ein möglichst großes Bildfeld, notwendig und keine hohe Auflösung. Die Geometrieparameter wurden für den Bereich hoher Vergrößerungen ($V = 120$) optimiert.

4.6.2 Die Elektronen–Energieverlust Spektroskopie

Der zweite Abbildungsmodus eines Projektivsystems im Anschluß an ein Energiefilter ist das Energieverlustspektrum. Zunächst soll auf eine Besonderheit aufmerksam gemacht werden. Die meisten Energiefilter haben sehr kurz hinter der achromatischen Bildebene einen Multipol, um dessen Quadrupolfeld zur Erzeugung eines runden Strahlenganges zu benutzen. Da in diesem Fall der Spektroskopie keine Energieselektion vorgenommen werden soll, läßt sich dieser Multipol auch zur Übertragung des Energieverlustspektrums nutzen. In den folgenden Rechnungen beginnt er, gemessen in SCOFF-Näherung von der achromatischen Bildebene bei 6 mm und ist 4 mm lang. Dafür wird ein Multipolelement des Bitriplett Systems ausgeschaltet, um die Anzahl der notwendigen Elemente nicht unnötig zu erhöhen.

Das Ergebnis der Rechnungen ist in den **Abbn. 4.26 bis 4.33** und in **Tab. 4.4** dargestellt. Verschiedene übertragene Energiefenster werden in SCOFF-Näherung und unter Berücksichtigung ausgedehnter Randfelder verglichen. Dabei gilt wiederum, daß die resultierenden Fundamentalbahnen und Ampèrewindungen kaum von der gewählten Näherung abhängen. Untersucht wurden beispielhaft Werte für die Spektren mit einer Fensterbreite von $\Delta E = 60, 200, 300, 500$ eV. Die Optimierung der Akzeptanz bezieht sich auf die Minimierung der Auslenkungen der Feldbahnen und der dispersiven Bahn. Bei dem kleinen Energiefenster von 60 eV spielt die disperse Bahn eine wesentlich geringere Rolle als bei dem größten Energiefenster von 500 eV. An den Bahnen vor der Detektorebene in den Abbn. erkennt man die Fokussierung als Strichabbildung. Die Nullstellen der Feldbahn im xz -Schnitt und der axialen Bahn im yz -Schnitt führen einen Punkt in der Beugungsebene in einen Bildstrich auf dem Detektor über. Die Vergrößerung im xz -Schnitt für die axiale Bahn ist so gewählt, daß das komplette Spektrum für das jeweilige Energiefenster mit der Breite

Energiefenster	Quadrupol Nr.	Ampèrewindungen [A] in SCOFF-Näherung	Ampèrewindungen [A] für die Randfeldrechnung
$\Delta E = 60 \text{ eV}$	0	-20.971	-18.500
	1	-30.046	-35.538
	3	16.986	19.555
	4	-23.615	-22.641
	6	24.457	29.639
$\Delta E = 200 \text{ eV}$	0	18.226	15.538
	1	27.742	25.872
	3	-26.249	-24.965
	4	15.391	14.931
	5	9.703	9.703
$\Delta E = 300 \text{ eV}$	6	-74.094	-72.826
	0	4.820	4.075
	1	23.496	22.548
	3	-25.813	-24.633
	4	16.025	14.308
$\Delta E = 500 \text{ eV}$	5	9.520	11.791
	6	-62.979	-63.189
	0	25.979	29.851
	1	18.369	17.434
	3	-24.844	-23.793
$\Delta E = 500 \text{ eV}$	4	14.713	14.298
	5	10.836	10.836
	6	-60.837	-62.372

Tabelle 4.4: Vergleich der Ampèrewindungen für die Abbildung des Energiespektrums für verschiedene Energiefenster in SCOFF-Näherung und mit Berücksichtigung ausgedehnter Randfelder.

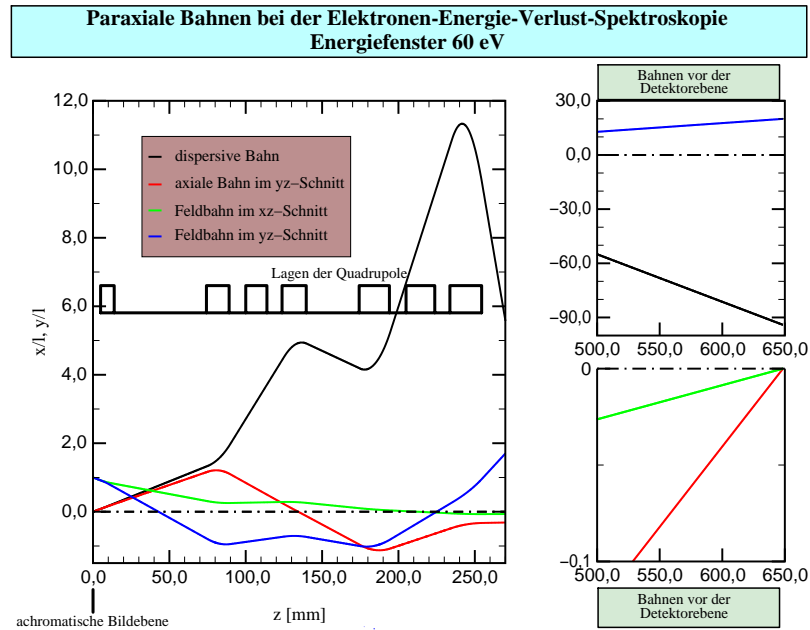


Abbildung 4.26: Die Fundamentalbahnen in SCOFF-Näherung für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 60$ eV.

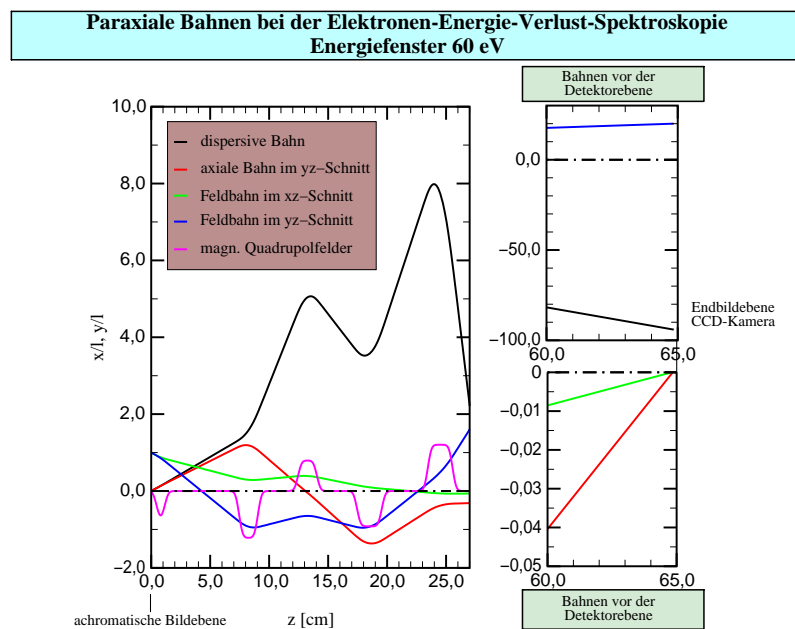


Abbildung 4.27: Die Fundamentalbahnen mit Berücksichtigung ausgedehnter Randfelder für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 60$ eV.

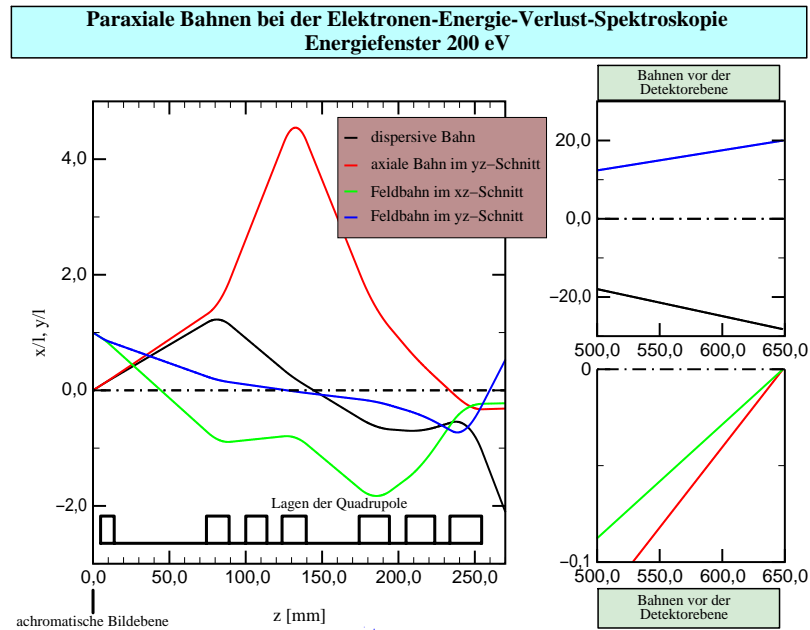


Abbildung 4.28: Die Fundamentalbahnen in SCOFF-Näherung für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 200$ eV.

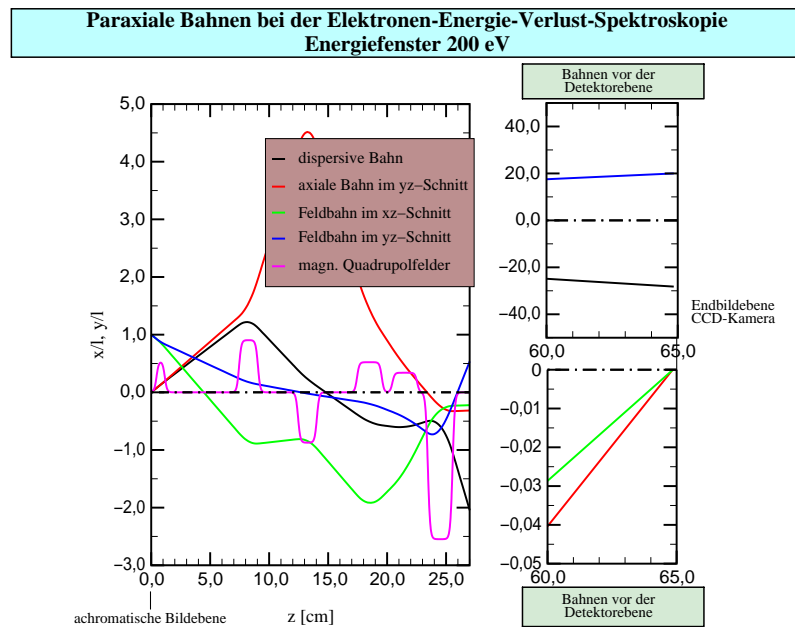


Abbildung 4.29: Die Fundamentalbahnen mit Berücksichtigung ausgedehnter Randfelder für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 200$ eV.

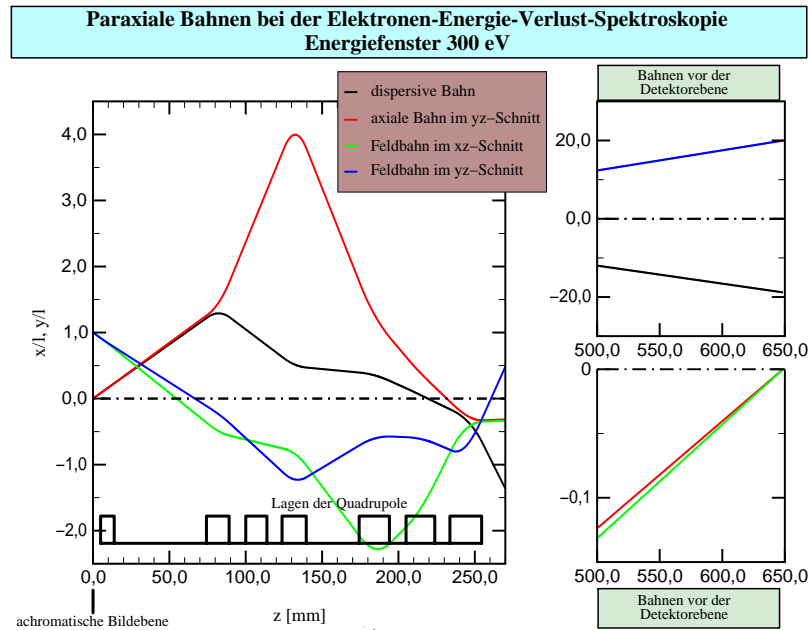


Abbildung 4.30: Die Fundamentalbahnen in SCOFF-Näherung für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 300$ eV.

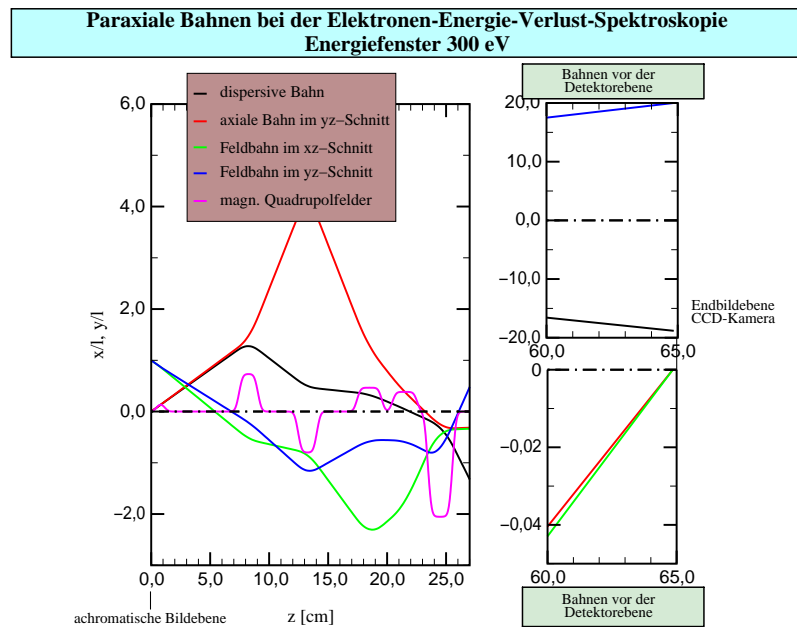


Abbildung 4.31: Die Fundamentalbahnen mit Berücksichtigung ausgedehnter Randfelder für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 300$ eV.

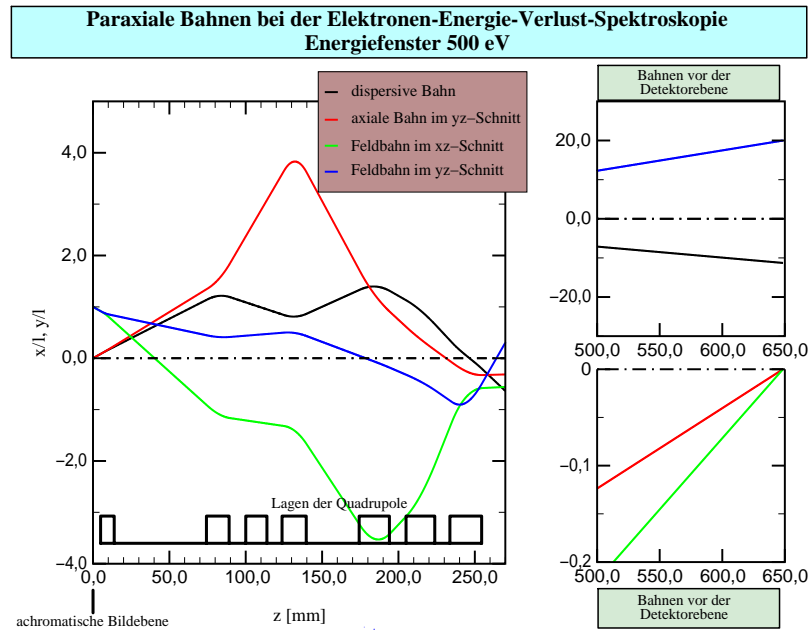


Abbildung 4.32: Die Fundamentalbahnen in SCOFF-Näherung für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 500$ eV.

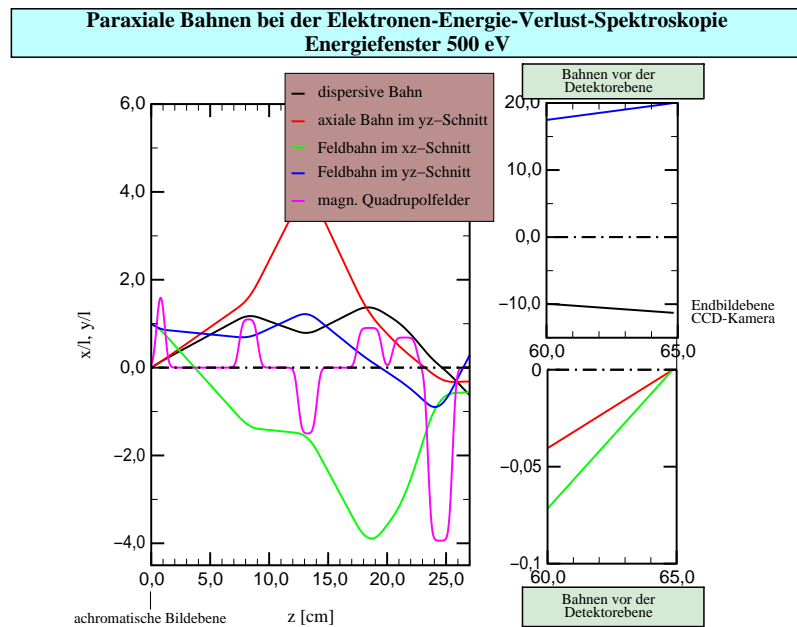


Abbildung 4.33: Die Fundamentalbahnen mit Berücksichtigung ausgedehnter Randfelder für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 500$ eV.

des Detektors übereinstimmt (s. Kap. 2.2), die Vergrößerung im yz -Schnitt beschreibt die Länge des abgebildeten Strichs. In der hier gewählten Einstellung werden etwa 60% einer 2048²-CCD Kamera in diesem Schnitt ausgeleuchtet. Die Lösungen für eine hundert prozentige Ausleuchtung bei Rechnungen mit dünnen Quadrupolen ließen sich für ausgedehnte Felder nicht reproduzieren. Die normierten Quadrupolstärken waren in diesem Fall zu groß.

Die Berechnung der Bildfehler für diese Art der Abbildung erfolgt nach dem selben Schema wie zuvor. Ein Äquivalent zur Verzeichnung ist für die Abbildung eines Energiespektrums die Dispersion zweiten und dritten Ranges im xz -Schnitt. Alle anderen Fehler im xz -Schnitt werden wiederum im quadratischen Mittel δx betrachtet. Die Fehler im yz -Schnitt dürfen den Bereich des Detektors nicht überschreiten. Diese schwache Forderung ergibt somit keinen relevanten Beitrag zur Fehlerbetrachtung. Vergleichsrechnungen zeigen, daß auch im Fall der Spektrumsabbildung die effiziente quadratische Mittelung der einzelnen Fehlerbeiträge zum Gesamtfehlerscheibchen hinreichend gut mit der exakten aber aufwendigen geometrischen Überlagerung der Bildfehler übereinstimmt.

Im Hinblick auf die Bewertung der Güte einer Spektrumsabbildung ist eine Umrechnung des Fehlerscheibchens auf eine Energieskala sinnvoll. Dazu kann man die Dispersion des vorgeschalteten Filters heranziehen. Als Beispiel für Energiefilter wird das MANDOLINE Filter [Uhlemann 1994] und das 90°-Filter [LEO] betrachtet. Die Ergebnisse finden sich in den Tabn. 4.5 und 4.6. Die Größe ΔE gibt das verwendete Energiefenster an und δE die berechnete Energieauflösung. Für ein Projektivsystem wird die Bezugsgröße $\Delta E \mathcal{D}$ betrachtet. Sie gibt die Breite des übertragenen Energiespektrums in der Energieselektionsebene an. Mit der Breite des verwendeten Detektors in der Endbildebene läßt sich somit die notwendige Vergrößerung im xz -Schnitt festlegen. Andererseits läßt eine solche Bezugsgröße die Wahl des verwendeten Energiefilters offen. Da nur das Produkt aus Dispersion und Energiefenster konstant ist, ist eine Einstellung des Projektivs für mehrere Filter zu verwenden. Wie in Tab. 4.6 zu erkennen, variiert dabei demzufolge die Breite des übertragenen Energiefensters in eV. Für die Fehlerrechnung kann dadurch auch die relative Energieabweichung κ eindeutig festgelegt werden.

$\Delta E \mathcal{D}$ [mm]	$\delta x [\mu m]$	$\alpha_{opt} [mrad]$	Dispersion [%] ($w_{\kappa\kappa\kappa}$)
0.372	0.16	3×10^{-3}	0.40
1.24	2.21	36×10^{-3}	0.08
1.86	4.10	68×10^{-3}	0.13
3.1	24.96	416×10^{-3}	0.11

Tabelle 4.5: Die Bildfehler bezogen auf die Energieselektionsebene bei der Abbildung des Energiespektrums. In der achromatischen Bildebene bzw. Energieselektionsebene wurde ein Bildfeld von 1 mm und eine Apertur von 10 mrad zur Berechnung des Fehlerscheibchens δx angenommen.

In der **Tab. 4.5**, deren Größen von der Wahl des Energiefilters unabhängig sind, wird ein optimaler Aperturwinkel angegeben. Hierbei wird berücksichtigt, daß im xz -Schnitt eine Abbildung des stark verkleinerten Beugungsbildes erfolgt, der x_α -Bahn, wobei man sich eigentlich nur für die Vergrößerung des Energiespektrums interessiert. Beide Effekte wirken entgegengesetzt, so daß sich ein Optimum angeben läßt. Die kleinste mögliche Energieauflösung δE bestimmt sich demnach dadurch, daß Beugungsbild und Fehlerscheibchen gleich groß gewählt werden. Aus dieser Bedingung läßt sich ein optimaler Aperturwinkel α_{opt} (s. Gleichungen (2.3), (2.4) und (2.5)) angeben. Der gesamte Öffnungswinkel errechnet sich dann aus dem doppeltem optimalen Aperturwinkel.

	MANDOLINE Filter		90°-Filter	
$\Delta E \mathcal{D}$ [mm]	ΔE [eV]	δE [meV]	ΔE [eV]	δE [meV]
0.372	60	26	196	84
1.24	200	356	653	1163
1.86	300	661	979	2158
3.1	500	4026	1632	13137

Tabelle 4.6: Die Energieauflösung bei der Abbildung des Energiespektrums bei verschiedenen Energiefenstern für zwei Energiefilter. Dispersion: $\mathcal{D}_{\text{MANDOLINE}} = 6.2 \frac{\mu\text{m}}{\text{eV}}$, Dispersion: $\mathcal{D}_{90^\circ\text{-Filter}} = 1.9 \frac{\mu\text{m}}{\text{eV}}$.

Nach dem hier Besprochenen legen die **Tabn. 4.5** und **4.6** die Güte der Abbildung des Energiespektrums für ein variables Energiefenster unabhängig von der Wahl des Energiefilters fest. Die Bezugsgröße $\Delta E \mathcal{D}$ läßt sich durch die variable Wahl des Energiefensters und der Dispersion des Filters an das Projektiv und die hier errechneten Werte anpassen. Über die Güte der Abbildung entscheidet die Energieauflösung für das jeweilige Energiefenster. Für kleine Energiefenster lassen sich Energieauflösungen erzielen, die auch in Verbindung mit einem Monochromator unterhalb der Quellausbreitung einer Elektronenquelle liegen. Eine sub-eV Untersuchung des Objektes wird durch ein solches Quadrupol-Projektivsystem nicht beeinträchtigt. Für große Energiefenster zeigen die Rechnungen, daß eine ausreichende Zahl von Bildpunkten des Spektrums übertragen wird. Die Untersuchung eines parallelen Elektronen Energieverlustspektrums ist somit als Ausgangspunkt für eine gezielte elementspezifische Abbildung mit einem solchen Projektiv durchführbar. Gerade die Möglichkeit sehr große Energiefenster zu wählen, erleichtert die Untersuchung der Spektren und ist die eigentliche Stärke eines solchen Akzeptanz optimierten Projektivs. Die hier berechnete Quadrupolanordnung erfüllt damit alle an ein praktisch einsetzbares EFTEM-Projektivsystem gestellten Forderungen.

Kapitel 5

Das Wien–Filter als abbildendes Energiefilter

Die Idee, eine Anordnung von gekreuzten homogenen elektrischen und magnetischen Feldern als Energieanalysator zu benutzen, geht auf [Wien 1898] zurück. Er benutzte das daraufhin nach ihm benannte Filter zur Messung der Geschwindigkeit und damit der Energie von Kathodenstrahlen. In der Folgezeit wurden diese Anordnungen gekreuzter Felder als Energie– bzw. Massenanalysatoren in der Ionenoptik genutzt. Ein Wien–Filter als abbildendes Energiefilter wurde z. B. von [Rose 1987a] und [Tsuno 1993] vorgeschlagen. Da in diesem Fall nicht nur eine Punktabbildung, sondern ein ganzes Bildfeld übertragen werden soll, sind einige weitere Überlegungen notwendig. Im ersten Abschnitt dieses Kapitels werden die dazu notwendigen Schritte geschildert.

Im Laufe der Entwicklung von Energiefiltern wurden sehr viele verschiedene Filter vorgeschlagen. Alle verwenden magnetische Umlenker und haben somit eine krumme optische Achse. Die einzige Möglichkeit ein Filter mit einer geraden Achse zu bauen, wird mit Gleichung (3.37)

$$e\mathbf{v} \times \mathbf{B} = e\mathbf{E}$$

angegeben. Der wesentliche Vorteil eines Wien–Filters ist somit eine gerade optische Achse. An dieser Stelle soll aber auch gesagt werden, daß die Verwendung elektrischer Felder die Anwendungen auf Mikroskope mit einer Säulenspannung unter 100 kV limitiert. Ebenso läßt sich eine ausreichende Dispersion nur über die Ausdehnung der Dipolfelder erzeugen. Das Filter ist somit nur für kleine Säulenspannungen brauchbar. Desweiteren läßt sich das Wien–Filter auch als Öffnungs– und Farbfehlerkorrektor für Niederspannungsmikroskope nutzen [Rose 1990b]. In dieser Anordnung wird ein doppelsymmetrisches Wien–Filter mit verschwindender Dispersion zur Bildfehlerkorrektur ausgenutzt. In leichter Abwandlung ließe sich ein solcher Korrektor auch als Monochromator für die Elektronenquelle nutzen.

Da in Gleichung (3.37) die Möglichkeit gekreuzter elektrischer und magnetischer Felder über einen ausgedehnten Bereich längs der geraden optischen Achse vorausgesetzt wird,

sollen die dadurch entstehenden Einschränkungen am Beispiel des Energiefilters im zweiten Abschnitt dieses Kapitels geschildert werden. Dabei wird deutlich, daß besonders im Randfeld die notwendigen Forderungen an den Feldverlauf nur durch weitere Maßnahmen zu erfüllen sind. Diese Maßnahmen lassen sich auch für alle weiteren vorgeschlagenen Systeme analog unter Einhaltung der jeweiligen Symmetrie längs der optischen Achse ausführen.

5.1 Grundlagen des Wien-Filters

Um die prinzipiellen Fokussierungseigenschaften eines Wien-Filters festzulegen, werden in diesem Kapitel alle Felder in der SCOFF-Näherung aus Kap. 3.5.1 behandelt. Da zunächst nur die Berechnung von Energiefiltern dargestellt werden soll, werden die Ausführungen aus [Rose 1987a] in den folgenden Rechnungen zugrunde gelegt und kurz skizziert. Für die gekreuzten Felder aus Bedingung (3.37) legt man eine Richtung fest. Die elektrischen Felder haben den größten Anteil ihrer Brechkraft im xz -Schnitt und die magnetischen Felder im yz -Schnitt. Damit lassen sich die ebenen Multipolkoeffizienten aus Kap. 3.2 einschränken, im elektrischen Fall auf $\Phi_\nu = \Phi_{\nu,c}$ und im magnetischen Fall auf $\Psi_\nu = \Psi_{\nu,s}$. Im Folgenden wird damit die Einschnittsymmetrie beschrieben.

Im ersten Schritt sollen die Fundamentalbahnen festgelegt werden. Ein Energiefilter wurde in der Einleitung als ein System beschrieben, das auf Elektronen mit nomineller Energie wie eine Rundlinse und für Elektronen mit abweichender Energie dagegen wie in der Lichtoptik als eine Kombination aus Rundlinse und Prisma wirkt. Betrachtet man die Differentialgleichung (3.35)

$$\begin{aligned} w'' &+ \frac{\Lambda (\Phi'_0 + i v_0 \Psi'_0)}{2\Phi^*} w' \\ &+ \frac{\Lambda}{4\Phi^*} \left(\Phi''_0 + i v_0 \Psi''_0 + \frac{\Phi_1 \bar{\Phi}_1}{2\Lambda \Phi^*} \right) w \\ &- \frac{\Lambda}{\Phi^*} \left(\Phi_2 + i v_0 \Psi_2 - \frac{\Phi_1^2}{8\Lambda \Phi^*} \right) \bar{w} \\ &= \frac{\Lambda}{2\Phi^*} (\Phi_1 + i v_0 \Psi_1) - \frac{U \Phi_1}{4\Phi^{*2}} \kappa \quad , \end{aligned}$$

sollte für eine gerade optische Achse zuallererst die Bedingung (3.36)

$$\frac{\Lambda}{2\Phi^*} (\Phi_1 + i v_0 \Psi_1) = 0$$

erfüllt werden. Damit ist die Wien-Bedingung (3.37) für den Fall der Dipolfelder erfüllt. Auf diese Bedingung ist streng zu achten, da sich ansonsten keine gerade Achse einstellen läßt. In Kap. 3.3.2 wurde ausführlich die Bedeutung dieses Termes in der Differentialgleichung (3.35) geschildert. Läßt man insbesondere im Randfeld Abweichungen von dieser Bedingung zu, läßt sich zwar hinter dem Filter wieder eine gerade optische Achse einstellen,

allerdings entstehen durch die Berechnung der optischen Achse w_Γ (s. Kap. 3.3.3) Kombinationsfehler erster und höherer Ordnung. Ein solches System eignet sich nicht für einen Korrektor bzw. ein hochauflösendes Energiefilter. Sie sind schon dadurch ausgeschlossen, daß die Felder aus dem Kap. 3.4 für große Permeabilitäten diese Bedingung ohne weiteres erfüllen können. Aus diesem Grund wird in allen weiteren Ausführungen mit oder ohne Randfeld eine strenge Erfüllung der Gleichung (3.36) vorausgesetzt.

Nach den bisher geschilderten Voraussetzungen und in Abwesenheit von Rundlinsenfeldern ($\Phi_0 = \Psi_0 = 0$) gilt innerhalb des Wien-Filters die Differentialgleichung

$$w'' + \frac{\Phi_{1,c}^2}{8\Phi^{*2}} w - \frac{\Lambda}{\Phi^*} \left(\Phi_{2,c} - v_0 \Psi_{2,s} - \frac{\Phi_{1,c}^2}{8\Lambda\Phi^*} \right) \bar{w} = -\frac{U\Phi_{1,c}}{4\Phi^{*2}} \kappa \quad (5.1)$$

für die Fundamentalbahnen. Der inhomogene Anteil auf der rechten Seite beschreibt die Wirkung des Filters als Prisma durch die dispersive Fundamentalbahn $w_\kappa \equiv x_\kappa$ (s. Kap. 3.3.2). Um die Anordnung generell als Rundlinse ohne einen Astigmatismus in erster Ordnung zu betreiben, muß noch der Faktor vor \bar{w} in Gleichung (5.1) verschwinden

$$\Phi_{2,c} - v_0 \Psi_{2,s} = \frac{\Phi_{1,c}^2}{8\Lambda\Phi^*} \quad . \quad (5.2)$$

Damit sind in paraxialer Näherung alle Bedingungen an die Felder festgelegt. Relativistische Effekte sind durch die niedrigen Säulenspannungen vernachlässigbar. Somit gilt für alle Rechnungen in diesem Kapitel $\Lambda \approx 1$ und $\Phi^* \approx \Phi_0 := \Phi$.

In SCOFF-Näherung lassen sich die Fundamentalbahnen durch trigonometrische Funktionen komplett analytisch berechnen. Wird ein einfachsymmetrisches Filter mit den Anfangsbedingungen aus **Abb. 5.1** vorausgesetzt, ergeben sich die Fundamentalbahnen zu

$$\begin{aligned} w_\alpha(z) &= -\sin(\Omega z) \\ w_\beta(z) &= -i \sin(\Omega z) \\ w_\gamma(z) &= \frac{1}{\Omega} \cos(\Omega z) \\ w_\delta(z) &= \frac{i}{\Omega} \cos(\Omega z) \\ w_\kappa(z) &= \frac{1 + \sin(\Omega z)}{\sqrt{2}\Omega} \end{aligned} \quad (5.3)$$

mit $\Omega = \frac{\Phi_{1,c}}{2\sqrt{2}\Phi}$ und der Bezugsebene $z_{I,M} = 0$. Die Gesamtlänge des Filters ergibt sich durch die Forderung eines Beugungsbildes am Ende $x_\gamma(z_{D_2}) = 0$ zu $(\Omega L) = \pi$. Die Dispersion des Filters im Beugungsbild $z_{D,2}$ beträgt

$$\mathcal{D} := \frac{x_\kappa(z_{D_2})}{e \Phi} = \frac{4}{e \Phi_{1,c}} \quad . \quad (5.4)$$

Damit ist das Wien-Filter aus **Abb. 5.1** in Gauß'scher Dioptik in der SCOFF-Näherung vollständig beschrieben. Vertauscht man die axialen und die Feldbahnen miteinander und

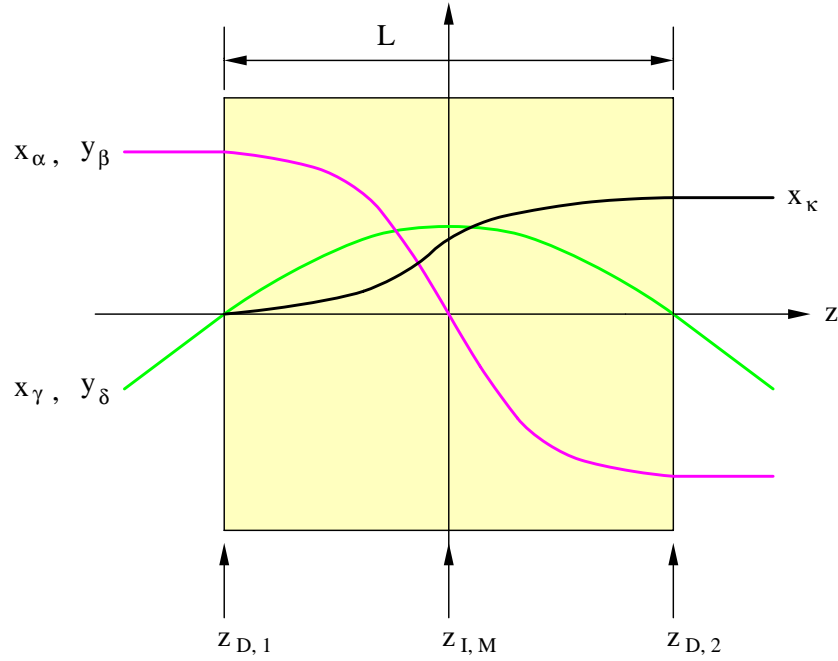


Abbildung 5.1: Eine Skizze der Fundamentalbahnen des einfachsymmetrischen Wienfilters.

benutzt zwei Systeme aus **Abb. 5.1** hintereinander, erhält man den doppelsymmetrischen Korrektur aus [Rose 1990b]. Fügt man in diesem System eine Energieselektionsebene in der Mittelebene $z_{I,M}$ ein, etwa durch eine 8- f Anordnung, ließe sich das resultierende System als Monochromator nutzen.

Da diese Anordnung als hochauflösendes Filter benutzt werden soll, ist zumindest eine Korrektur der geometrischen Bildfehler zweiter Ordnung notwendig. Zur Berechnung wird wieder die Schreibweise (3.121) benutzt. Die Gleichung, die für die Bildfehler zweiten Ranges ursächlich ist, ergibt sich nach einigen partiellen Integrationen und Ausnutzen von Gleichung (5.1) zu

$$\begin{aligned}
 W^{(2)}(z) = & \left[-\sqrt{\Phi} \Re \left(\frac{1}{16} \frac{\Phi_{1,c} + v_0 \Psi_{1,s}}{\Phi} \bar{w}^2 w' + \frac{1}{8} \frac{\Phi_{1,c} - v_0 \Psi_{1,s}}{\Phi} w \bar{w} \bar{w}' \right. \right. \\
 & \left. \left. - \frac{1}{16} \left(\frac{\Phi'_{1,c}}{\Phi} + \frac{1}{2} \frac{\Phi_{1,c} \Phi'}{\Phi^2} \right) w \bar{w}^2 + \frac{\kappa}{4} w' \bar{w} + \frac{\kappa}{8} \frac{\Phi'}{\Phi} w \bar{w} \right) \right]_{z_0}^z \\
 & - \Sigma^{(2)}(z) \quad ,
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

mit

$$\begin{aligned}
 \Sigma^{(2)}(z) = & \int_{z_0}^z \sqrt{\Phi} \Re \left(\frac{1}{8} \frac{v_0 \Psi_{1,s} - \Phi_{1,c}}{\Phi} w \bar{w}'^2 + \frac{1}{16} \frac{\Phi' 3\Phi_{1,c} - v_0 \Psi_{1,s}}{\Phi} w \bar{w} w' \right. \\
 & + \frac{1}{32} \frac{\Phi' 3\Phi_{1,c} + v_0 \Psi_{1,s}}{\Phi} w' \bar{w}^2 + \left(-\frac{v_0 \Psi_{1,s}}{64\Phi} \frac{2\Phi'' + \Phi_{1,c}^2}{2\Phi} \right. \\
 & - \frac{1}{8} \frac{\Phi_{1,c} \Phi_{2,c}}{\Phi^2} + \frac{13}{128} \frac{\Phi_{1,c} \Phi''}{\Phi^2} + \frac{9}{128} \frac{\Phi_{1,c}^3}{\Phi^3} - \frac{3}{64} \frac{\Phi_{1,c} \Phi'^2}{\Phi^3} \Big) w \bar{w}^2 \\
 & + \left(\frac{\Phi_{3,c} - v_0 \Psi_{3,s}}{2\Phi} - \frac{1}{8} \frac{\Phi_{1,c} \Phi_{2,c}}{\Phi^2} + \frac{1}{64} \frac{\Phi_{1,c}^3}{\Phi^3} \right) \bar{w}^3 \\
 & + \left(\frac{3}{16} \frac{\Phi'^2}{\Phi^2} + \frac{5}{32} \frac{\Phi_{1,c}^2}{\Phi^2} - \frac{1}{32} \frac{v_0 \Psi_{1,s} \Phi_{1,c}}{\Phi^2} \right) w \bar{w} \kappa \\
 & \left. + \left(\frac{7}{64} \frac{\Phi_{1,c}^2}{\Phi^2} + \frac{1}{64} \frac{v_0 \Psi_{1,s} \Phi_{1,c}}{\Phi^2} - \frac{1}{4} \frac{\Phi_{2,c}}{\Phi} \right) \bar{w}^2 \kappa + \frac{1}{4} \frac{\Phi_{1,c}}{\Phi} \bar{w} \kappa^2 \right) dz .
 \end{aligned}$$

Bisher wurde nur die Einschnittsymmetrie ausgenutzt. Im nächsten Schritt setzt man die Bedingung (3.36) für eine gerade optische Achse und die Bedingung (5.2) für eine paraxiale runde Abbildung ein. Da die Integrationsgrenzen zumeist im feldfreien Raum liegen, können die Restterme der partiellen Integration vernachlässigt werden. Außerdem dürfen keine Rundlinsenfelder innerhalb der Multipolfelder erregt werden. Die jetzt verbliebenen Freiheitsgrade, die genaue Festlegung der elektrischen und magnetischen Quadrupole und der Hexapolfelder, lassen sich für eine vollständige Korrektur der geometrischen Bildfehler zweiter Ordnung nutzen. Nach [Rose 1987a] müssen folgende Bedingungen an die Felder gestellt werden:

$$\begin{aligned}
 \Phi_{2,c} = \frac{1}{2} \frac{\Phi_{1,c}^2}{\Phi} , \quad \Psi_{2,s} &= \frac{3}{8} \frac{v_0 \Psi_{1,s}^2}{\Phi} \\
 \Phi_{3,c} - v_0 \Psi_{3,s} &= \frac{3}{32} \frac{\Phi_{1,c}^3}{\Phi^2} .
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

Gleichung (5.5) wird nach dem Einsetzen der Bedingungen (3.36), (5.2) und (5.6) auf die Farbfehlerterme zweiten Ranges reduziert. Nur die axialen Farbfehler und die Dispersion zweiten Ranges jeweils in der Bild- und Beugungsebene ergeben Bildfehler. Die Gleichung (5.5) läßt sich demnach abkürzend schreiben

$$W^{(2)}(z) = C_{\alpha\alpha\kappa}(\alpha^2 + \beta^2)\kappa + C_{\gamma\gamma\kappa}(\gamma^2 + \delta^2)\kappa + C_{\alpha\kappa\kappa}\alpha\kappa^2 + C_{\gamma\kappa\kappa}\gamma\kappa^2 . \tag{5.7}$$

Die Fehlerkoeffizienten lassen sich in der hier verwendeten Näherung analytisch berechnen.

Das Konzept eines hochauflösenden Wienfilters ist hiermit vollständig dargelegt und verspricht eine Fehlerkorrektur in zweiter Ordnung. Entscheidend wird sein, wie genau die Bedingungen an die Multipolfelder (3.36), (5.2) und (5.6) vor allem im bisher vernachlässigten Randfeld erfüllt werden können. Dies wird Thema des nächsten Abschnittes sein. Eine kurze Beschreibung des Vorgehens ist aus **Tab. 5.1** ablesen. Minimal reichen in der SCOFF-Näherung fünf Multipolfelder für eine optimale Anordnung aus.

Bedingung	Funktion
$\Phi_\nu = \Phi_{\nu,c} , \quad \Psi_\nu = \Psi_{\nu,s}$	Einschnittsymmetrie
$\Phi_{1,c} = v_0 \Psi_{1,s}$	gerade optische Achse
$\Phi_{2,c} - v_0 \Psi_{2,s} = \frac{\Phi_{1,c}^2}{8\Phi}$	resultierende Wirkung der Anordnung als Rundlinse
$\Phi_{2,c} = \frac{1}{2} \frac{\Phi_{1,c}^2}{\Phi} , \quad \Psi_{2,s} = \frac{3}{8} \frac{v_0 \Psi_{1,s}^2}{\Phi}$	Fehlerkorrektur zweiter Ordnung
$\Phi_{3,c} - v_0 \Psi_{3,s} = \frac{3}{32} \frac{\Phi_{1,c}^3}{\Phi^2}$	Fehlerkorrektur zweiter Ordnung

Tabelle 5.1: Die Bedingungen an die Multipolfelder für ein in zweiter Ordnung korrigiertes Wien–Filter in der SCOFF–Näherung.

5.2 Das Wien–Filter mit Randfeld

Das Verhalten der Fundamentalbahnen aus **Abb. 5.1** mit Bedingungen an die Felder in **Tab. 5.1** müssen für realistische Felder untersucht werden. Dazu wird das Randfeldmodell aus Kap. 3.4.1 ausgenutzt. Die ersten beiden Gleichungen aus **Tab. 5.1** lassen sich durch das Multipolelement aus **Abb. 3.3** erfüllen. Eine gerade optische Achse ist also zu erreichen. Dies ist nicht möglich für die restlichen drei Bedingungen, da Multipole verschiedener Zähligkeit unterschiedliche Verläufe des Randfeldes besitzen. Die Anordnung mit Randfeld wird einen Astigmatismus erster Ordnung aufweisen (dritte Bedingung aus **Tab. 5.1**). Die Fehlerkorrektur zweiter Ordnung wird ebenfalls nicht vollständig sein. Die Ausnahme hierbei ist der doppelsymmetrische Korrektor, für den aufgrund der Symmetrie eine vollständige Korrektur zweiten Ranges [Rose 1990b] gelingt. In diesem Fall müssen allerdings die Fundamentalbahnen so eingestellt werden, daß sie keinen Astigmatismus erster Ordnung aufweisen und sie demnach die Bedingung (5.2) erfüllen.

Da die Berechnung der Bahnen durch die Auswertung des Randfeldes numerisch aufwendig ist, rechnet man am günstigsten von der Mitte der Anordnung aus **Abb. 5.1** bis zum Ende. Für symmetrische Feldbahnen x_γ und y_δ muß dabei die Steigung in der Ebene $z_{I,M}$ verschwinden, die antisymmetrischen axialen Bahnen müssen in dieser Ebene eine Nullstelle haben. Die Bedingungen am Ende des Filters sind die Forderungen nach einem teleskopischen Austritt für die antisymmetrischen Bahnen und nach einer Nullstelle der symmetrischen Bahnen in der Ebene $z_{D,2}$. Da die Beugungsebene nicht eindeutig festgelegt ist und innerhalb des letzten Dipolelementes des Filters liegt, ist es günstiger, eine Bedingung an die Feldbahnen im feldfreien Raum $z \gg z_{D,2}$ zu stellen. Die vollständige Übereinstimmung im xz –Schnitt und yz –Schnitt läßt sich durch einen noch beliebigen freien Faktor auf die Feldbahnen bzw. die axialen Bahnen herstellen. In einer beliebigen Ebene hinter der Ebene $z_{D,2}$ sind demnach die teleskopischen Bedingungen $x'_\alpha = y'_\beta = 0$ und $x_\gamma = y_\delta$ zu erfüllen. Dabei wurden die Helmholtz–Lagrange Sätze (3.49) berücksichtigt.

Zur Berechnung der Bahnen dienen die gleichen Methoden wie in Kap. 4.5, das Runge–

Kutta-Verfahren von Dormand und Prince [Spellucci 1990] und das mehrdimensionale Newton-Verfahren.

Um die Bedingung (5.2) zumindest in integraler Wirkung und nicht in jeder Ebene z zu erfüllen, fehlen allerdings Parameter, denn die vorhandenen Quadrupolfelder gewährleisten die Eigenschaft der Anordnung als Rundlinse nur innerhalb des Bereiches maximaler Feldstärke. Der Fehler in der Fokussierung durch den falschen Randfeldverlauf von Quadrupol- und Dipolfeldern kann durch zusätzliche Quadrupolfelder ausgeglichen werden. Um die Fehler bei der Fokussierung getrennt nach Feldbahnen und axialen Bahnen zu beeinflussen, nutzt man geschickterweise Nullstellen der jeweiligen Bahnen aus, um den unerwünschten Einfluß schwach zu halten. Betrachtet man **Abb. 5.1**, ist leicht die Position solcher zusätzlicher Quadrupole zu erkennen. Sie liegen sinnvollerweise in den Ebenen $z_{D,1}$, $z_{I,M}$ und $z_{D,2}$. Nach den obigen Überlegungen reichen zwei verschiedene Quadrupole und die Lage der Beugungsebene $z_{D,2}$ als Parameter aus, um eine erster Ordnung stigmatische verzeichnungsfreie Fokussierung einzustellen. Damit wirkt die Anordnung aus **Abb. 5.1** wiederum wie eine Rundlinse auf Elektronen mit nomineller Energie. Zur baulichen Vereinfachung wurde eine Drittelung der Polschuhe angenommen, so daß unter Einhaltung der Symmetrie der Felder die geforderten zwei Quadrupolfelder zur Verfügung stehen. Die neu berechnete Lage der Beugungsebene $z_{D,2}$ berücksichtigt die Randfelder der Dipole im Gegensatz zur SCOFF-Näherung, in der diese Ebene genau auf der Kante der Felder liegt. Bei diesem Vorgehen sollte betont werden, daß die Werte für die in SCOFF-Näherung berechneten Feldstärken als Ausgangswerte verwendet wurden. Der zusätzliche stigmatisierende elektrische Quadrupol wurde nur auf den mittleren Elektroden des gedrittelten Multipoles aufgebracht. Aufgrund von Hysterese-Effekten ist es sinnvoll, nur elektrische Quadrupolfelder aus Gleichung (5.2) zu verändern. Durch Verwendung der Startwerte aus der SCOFF-Näherung ist für diese numerische Rechnung garantiert, daß die Bedingungen für die Fehlerkorrektur aus **Tab. 5.1** nur geringfügig im zweiten Rang verletzt werden.

Für die Realisierung des Filters werden außerdem noch weitere elektrische Rundlinsenfelder außerhalb des Wien-Filters angenommen. Zur Feldberechnung wird dabei, ähnlich wie in Kap. 4.5 schon geschildert, das Modell von [Lenz 1950] berücksichtigt. Da hier das Filter und nicht die Eigenschaften der Rundlinsen untersucht werden, ist diese Näherung durchaus ausreichend. Die Eintrittslinse stellt den teleskopischen Strahlengang her und definiert die Lage von eintretender Bild- und Beugungsebene. Sie gewährleistet damit die angepaßte Optik für das verwendete Mikroskop. Die Brennweite dieser Linse ist die ideale Normierungslänge für das Filter. Die Austrittslinse gibt die Lage der achromatischen Bildebene an. Das Austrittsduplett mit zwei elektrischen Rundlinsen gewährleistet eine eindeutige Lage der Energieselektionsebene im feldfreien Raum und geometrisch ausreichend Platz für den Energieselektionsschlitz. Alle bisher geschilderten Rundlinsen verwenden eine symmetrische 1:1-Abbildung. Die letzte Rundlinse des Austrittsdupletts ist allerdings eher als erste Projektivlinse zu verstehen. Daher sollte die hier dargestellte Brechkraft nur zur Verdeutlichung angesehen werden. Das Ergebnis der numerischen Berechnung der Fundamentalbahnen der geschilderten Anordnung ist in **Abb. 5.2** zu sehen. Insbesondere zwischen Eintritts- und Austrittslinse ist der astigmatische Verlauf der Fundamentalbahnen innerhalb des Wien-

Paraxiale Bahnen eines Wien-Filters mit ausgelagerter Energieselektionsebene

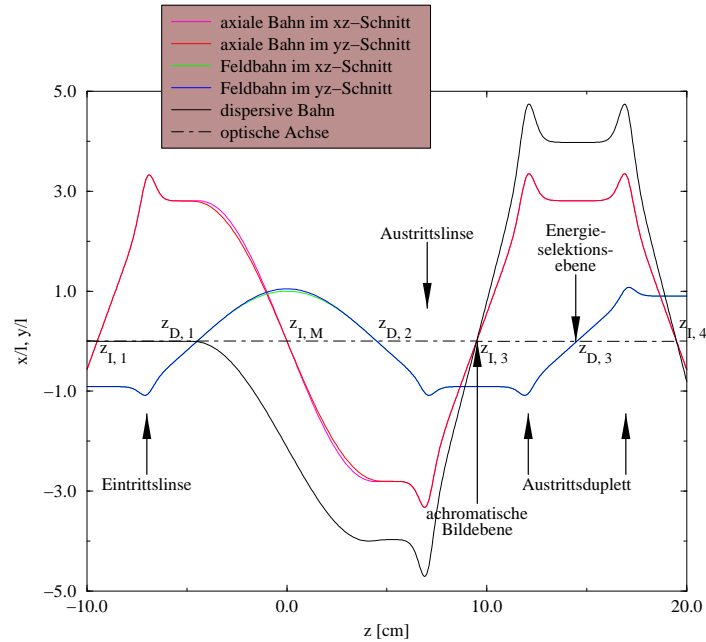


Abbildung 5.2: Die Fundamentalbahnen des Wienfilters mit Randfeld und Anpassungsop-
tik.

Die Stärken der Multipolkoeffizienten des Wien-Filters

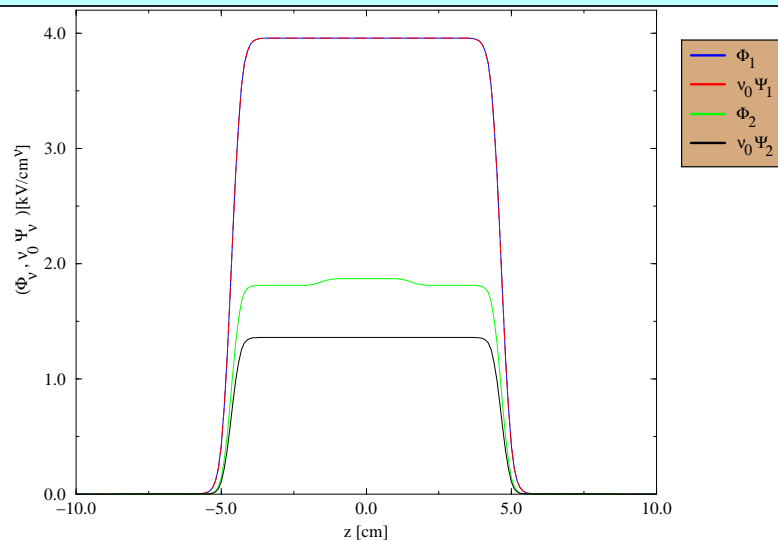


Abbildung 5.3: Die Multipolkoeffizienten des Wienfilters mit Randfeld.

Filters zu erkennen. Hinter dem Filter verläuft die dispersive Bahn wie in Kap. 2 gefordert linear abhängig zur axialen Bahn x_α .

Die Drittelung der Polschuhe und den zusätzlichen Quadrupolanteil erkennt man in **Abb. 5.3**, in der die Multipolfelder für die Berechnung der Bahnen aus **Abb. 5.2** dargestellt werden. Die numerischen Rechnungen ergeben eine Lage der Beugungsebene bei $z_{D,2} = 4.3854149$ cm und eine Dispersion des Filters von $\mathcal{D} = 9.936 \frac{\mu\text{m}}{\text{eV}}$ bei einer Säulenspannung von $U = \Phi = 4$ kV.

Die Bildfehler zweiter Ordnung mit Berücksichtigung des Randfeldes müssen nach Formel (5.5) berechnet werden. Diesmal wurde für die numerische Integration eine einfache Trapezformel verwendet. Die geometrischen Bildfehler zweiter Ordnung sind in **Abb. 5.4** dargestellt. Die Hexapolfeldstärke wurde nach dem Wert der SCOFF-Rechnung (zweite Gleichung von 5.6) eingestellt. Alle Fehlerintegrale mit antisymmetrischen Integranden verschwinden automatisch. Die Fehlerintegrale mit symmetrischen Integranden verschwinden in SCOFF-Näherung nur aufgrund der beiden Forderungen (5.6). Durch das Randfeld ist eine Korrektur der symmetrischen Fehler nicht mehr gegeben. Ebenso reicht ein Hexapol nicht mehr aus, um die fünf verbliebenen Koeffizienten zu korrigieren. Generell ist zu sagen, daß alle geometrischen Bildfehler in der SCOFF-Näherung in jeder Ebene z verschwinden würden. Die in **Abb. 5.4** gezeigten Kurven werden alleine durch den Einfluß des Randfeldes hervorgerufen.

Für die Farbfehler zweiten Ranges ist das Filter bereits in SCOFF-Näherung nicht korrigiert. Durch die gewählte Einschnittsymmetrie sind die ursprünglich komplexen Koeffizienten rein reell. Die Bahnen der chromatischen Koeffizienten zweiten Ranges sind in **Abb. 5.5** zu sehen. Die Fehlerbeiträge der aus Rundlinsen bestehenden Anpassungsoptik sind kleiner als die des Filters. Im wesentlichen liefert die dispersive Bahn im Filter die größten Fehlerbeiträge, da auf sie keinerlei Symmetrieargument innerhalb des Filters angewendet werden kann. Daraus folgt, daß eine Korrektur nur durch zusätzliche Hexapole durchgeführt werden könnte. Die Kombinationsfehler entsprechend diesen Überlegungen zu korrigieren, würde eine sehr hohe Zahl an Elementen erfordern und ist bisher für abbildende Energiefilter auch noch nicht durchgeführt [Uhlemann 1994].

Insgesamt betrachtet sind aus den oben erwähnten Gründen alle Bildfehler zweiten Ranges klein, da sie alleine aus den beschriebenen Randfeldeffekten hervorgehen. Im Vergleich zu dem Wertebereich der Fundamentalbahnen aus **Abb. 5.2** kann man diese Überlegung einsehen.

5.3 Ausblick

In [Rose 1987a] werden die verbliebenen Farbfehler zweiten Ranges in SCOFF-Näherung bewertet. Da aber durch den Hexapol und die schwache Abweichung von der SCOFF-Näherung die Bildfehler zweiten Ranges klein sein werden, ist keine sinnvolle Beurteilung des Filters möglich. Erst nach Berechnung der begrenzenden Bildfehler dritten Ranges kön-

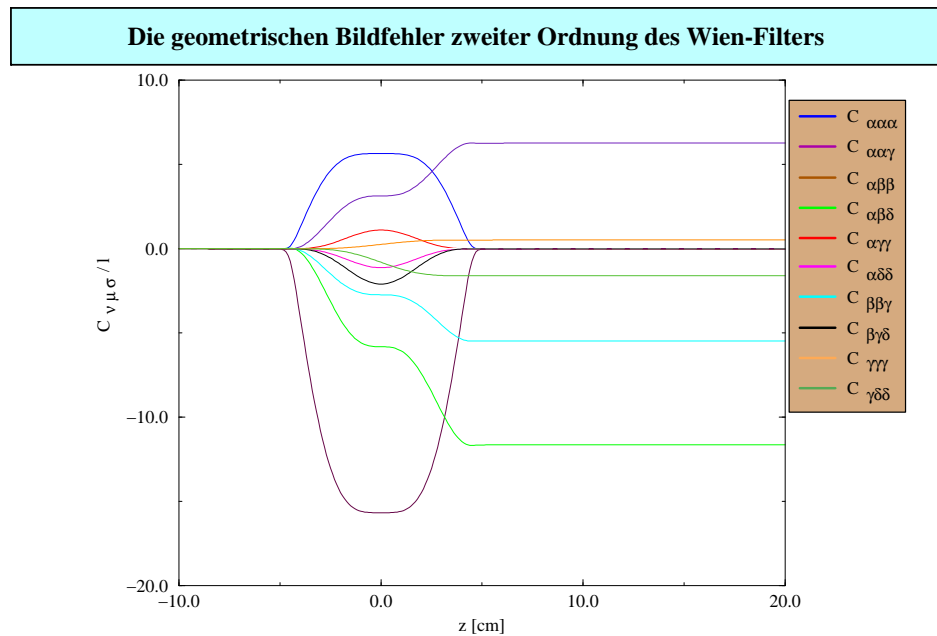


Abbildung 5.4: Die Bahnen der geometrischen Bildfehlerkoeffizienten des Wienfilters mit Randfeld.

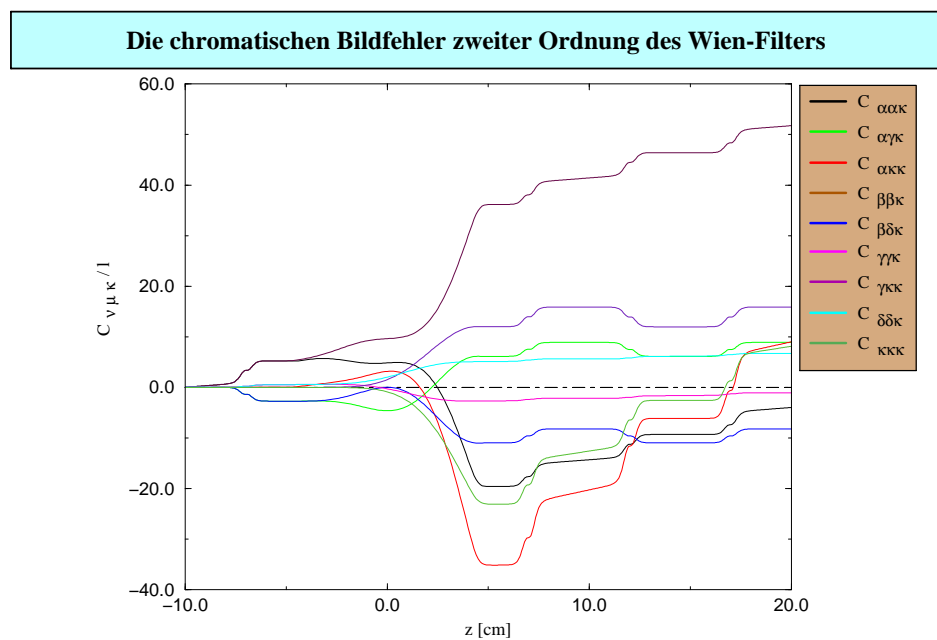


Abbildung 5.5: Die Bahnen der chromatischen Bildfehlerkoeffizienten des Wienfilters und der Anpassungsoptik mit Randfeld.

nen die Leistungsgrenzen eines Wien-Filters realistisch aufgezeigt werden. Hierbei müssen dann auch Kombinationsfehler dritten Ranges, die aus Fehlern zweiten Ranges resultieren, berücksichtigt werden. Insofern lohnt eine Korrektur zumindest der zweiten Ordnung.

Durch die vorgeschlagene Drittelung des Filters können, bei Einhaltung der Feldsymmetrie, zwei zusätzliche Hexapole eingesetzt werden. Dies ist aber bei fünf verbleibenden geometrischen Fehlern nicht ausreichend. Zudem ist z. B. für die elementspezifische Abbildung in der **Abb. 5.4** erkennbar, daß die drei Bildfehler des Astigmatismus zweiter Ordnung $C_{\alpha\alpha\gamma}$, $C_{\beta\beta\gamma}$ und $C_{\alpha\beta\delta}$ eine stärkere astigmatische Aufspaltung der Fundamentalbahnen wünschenswert erscheinen lassen, um in den Fehlerintegralen nennenswerte Abweichungen für eine Korrektur mit Hexapolen zu erreichen. Anhand Formel (5.5) ist nämlich zu erkennen, daß nur verschiedene Werte der Fundamentalbahnen in unterschiedlichen Ebenen für eine getrennte Korrektur in beiden Schnitten ausschlaggebend sind. Demzufolge wären astigmatische Zwischenbilder für ein solches Vorhaben am besten geeignet. In **Abb. 5.2** ist abzulesen, daß durch die Drittelung der Polschuhe nur eine geringe astigmatische Aufspaltung erreicht werden kann. Besser ist es, in die Beugungsebenen $z_{D,1}$ und $z_{D,2}$ einen kurzen Multipol zu legen und für die Zwischenräume einen langen Multipol zu verwenden. Konsequenterweise können dann auch fünf Multipole betrachtet werden, wobei in den Ebenen $z_{D,1}$, $z_{I,M}$ und $z_{D,2}$ kurze Multipole und in den Zwischenräumen lange Multipole liegen würden. Die gesamte Anordnung würde mit den Dipol- und Quadrupolfeldern nach SCOFF-Rechnung fokussiert. Im mittleren Multipol würde, wie zuvor in Kap. 5.2 geschehen, die Bedingung (5.2) in integraler Wirkung erfüllt, indem dort der geforderte zusätzliche Quadrupol zur Verfügung gestellt wird. Ob die Fundamentalbahnen in einer solchen Anordnung stigmatisch und erster Ordnung verzeichnungsfrei eingestellt werden können, müßte gesondert geklärt werden. Da dies bei einer Drittelung der Polschuhe möglich ist, sollte das auch hier einzustellen sein. Insbesondere sollte wie gewünscht eine ausgeprägtere astigmatische Aufspaltung entstehen. Außerdem sind bei Einhaltung der Symmetrie drei unabhängige Hexapolfelder einstellbar. Eine vollständige geometrische Korrektur zweiter Ordnung wäre allerdings erst mit zwei zusätzlichen internen oder externen Hexapolen möglich. Das wichtigste bei der Wahl der Lage dieser Hexapole ist, daß genügend Freiheitsgrade durch eine astigmatische Aufspaltung zur Verfügung gestellt werden, so daß im xz -Schnitt sowie im yz -Schnitt die Fehlerbahnen unabhängig voneinander beeinflusst werden können. Die Ausführung der vorgestellten Ideen würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen.

Die stigmatische Korrektur für die Fundamentalbahnen wurde in Kap. 5.2 für eine Drittelung der Polschuhe gezeigt. Der Bau eines solchen Filters ist in einem Photoemissions-Elektronenmikroskop geplant [Marx 1997].

Die schon geschilderte Verwendung der Anordnung als Korrektor oder gar als Monochromator läßt die Diskussion der Bildfehler zweiten Ranges als überflüssig erscheinen. Durch die hier mögliche Doppelsymmetrie verschwinden alle geometrischen Bildfehler zweiter Ordnung und die Farbfehler zweiten Ranges sind nach [Rose 1990b] korrigierbar. Für den Monochromator muß allerdings wie schon geschildert in der Mittelebene eine Energieselektionsebene zur Verfügung gestellt werden. Wesentlich ist, daß durch die in Kap. 5.2 gezeigte erste Ordnung eine stigmatische und verzeichnungsfreie Korrektur der Fundamentalbahnen

ermöglicht wird. Die zur Einhaltung der für die Bildfehlerkorrektur höheren Ranges wichtigen Symmetrie der Fundamentalbahnen kann mit dem hier dargelegten Konzept auch mit Hilfe des Randfeldes erzeugt werden.

Voraussetzung für die Realisierung einer Wien-Filter artigen Anordnung ist die saubere Einhaltung der gekreuzten elektrischen und magnetischen Dipolfelder nach Gleichung (3.36) unabhängig von der Ebene z . Eine Verletzung dieser Bedingung würde schon in Null'ter Ordnung die optische Achse krümmen. Aus diesem Grund sind die Schwankungen der elektrischen und magnetischen Dipolfeldstärke wohl die entscheidenden Kriterien für eine Realisierung einer solchen Anordnung. Insbesondere in der Verwendung als Korrektor ist zu erwähnen, daß durch eine Verletzung der geraden optischen Achse Kombinationsfehler höherer Ordnung entstehen. Diese Eigenschaft gekreuzter Dipolfelder ist für Wien-Filter artige Systeme eine der Schwächen, da sie hohe Anforderungen an die Justierung der Felder stellen. Sie ist aber zugleich auch eine ihrer Stärken, denn so ist die einzige mögliche Anordnung zu erzeugen, die eine gerade optische Achse und eine dispersive Bahn im gleichen Element ermöglicht.

Kapitel 6

Zusammenfassung

Im Verlauf der letzten Jahre wurde eine immer größere Anzahl von Transmissionselektronenmikroskopen mit abbildenden In-Column Energiefiltern entworfen. Mit Hilfe eines solchen Filters lassen sich sowohl energiegefilterte Abbildungen (ESI, Element Spezifische Imaging) als auch Energieverlustspektren (EELS, Electron Energy Loss Spectroscopy) der ausgeleuchteten Region des Objektes aufnehmen. Dies stellt im Vergleich zu einem Transmissionselektronenmikroskop ohne Energiefilter deutlich höhere Anforderungen an das Projektivsystem. Das Projektiv muß in der Lage sein, sowohl die achromatische Bildebene als auch die Spektrumsebene des Energiefilters mit jeweils variabler Vergrößerung auf die CCD-Kamera abzubilden, um sowohl das Spektrum als auch ein energiegefiltertes Bild bei unterschiedlichen Mikroskopvergrößerungen unter Ausnutzung der gesamten Fläche des Detektors aufnehmen zu können.

Das in dieser Arbeit vorgestellte Quadrupolprojektivsystem ist in der Lage, alle genannten Anforderungen zu erfüllen. Ein wesentlicher Vorteil gegenüber einem Rundlinsensystem ist sein astigmatischer Abbildungsmodus für die Spektrumsebene. Das Spektrum wird entlang der Achse senkrecht zur Dispersionsrichtung soweit auseinandergezogen, daß die gesamte Höhe der CCD-Kamera ausgenutzt wird. Die Abbildung erfolgt nur in Dispersionsrichtung. Dies verringert die Gefahr von Sättigungseffekten deutlich, da die Elektronen eines Energiekanals von einer ganzen Spalte der CCD-Kamera anstelle von nur einigen wenigen Pixeln registriert werden.

Der einstellbare Vergrößerungsbereich ist bei weitem ausreichend, um sowohl hochaufgelöste Aufnahmen als auch Übersichtsaufnahmen zu ermöglichen. Obwohl das System aus nur sechs Quadrupolen besteht, sind seine Aberrationen so klein, daß sie weder die sub-eV Energieauflösung der kommenden Generation von Hochleistungsfiltern [Uhlemann 1994] noch die sub-Å Auflösung von öffnungsfehlerkorrigierten Transmissionselektronenmikroskopen beschränken. Die in Projektiven normalerweise dominierenden Bildfehler der Verzeichnung beispielsweise sind mit 1.4% um mehr als die Hälfte gegenüber den Bildfehlern in allen bisherigen unkorrigierten Systemen reduziert. Eine weitere Korrektur der Bildfehler wäre allenfalls in den Grenzbereichen der Abbildung mit gleichzeitig großem übertragenem Ob-

jektbereich und großen Energiefenstern erforderlich.

Dieses Projektivsystem ermöglicht – kombiniert mit einer hinreichend monochromatisierten Quelle und einem hochdispersiven fehlerarmen Energiefilter – erstmals die Kombination von sub-Å Ortsauflösung mit sub-eV Energieauflösung in einem Mittelspannungs Transmissionslektronenmikroskop.

Das Wien-Filter, das im Anschluß an das Projektivsystem untersucht wird, hat den grundsätzlichen Nachteil, nur in Mikroskopen mit niedriger Säulenspannung einsetzbar zu sein. Durch seine gerade optische Achse hat es dort allerdings große Vorteile. Die Justierung des Filters ist einfacher, da keine Polschuhe mit gekrümmter optischer Achse zueinander ausgerichtet werden müssen. Im Gegensatz zu anderen Arbeiten, in denen versucht wird, den Randfeldverlauf durch Verformung der Elektroden und Polschuhe für eine stigmatische Abbildung einzustellen, wird in dieser Arbeit eine andere Idee verfolgt. Durch eine Segmentierung der Polschuhe längs der optischen Achse ist eine stigmatische Abbildung erreichbar. Dabei nimmt man innerhalb des Filters einen astigmatischen Verlauf der Elektronenbahnen in Kauf. Zu untersuchen ist noch die Frage, ob diese Aufspaltung zur Korrektur der geometrischen Bildfehler ausgenutzt werden kann. Setzt man diese Anordnung als Korrektur für den Öffnungs- und axialen Farbfehler oder als Monochromator ein, ist die Segmentierung auch für die Korrektur der geometrischen Bildfehler zweiter Ordnung erfolgreich.

Literaturverzeichnis

- [Abbe 1876] Abbe, E. (1876). Die optischen Hilfsmittel der Mikroskopie. Bericht über die wissenschaftlichen Apparate auf der Londoner internationalen Ausstellung (1876), Hrsg. Hoffmann, A. W. (1878), Braunschweig, 383, in Abbe, E. (1904), Gesammelte Abhandlungen, Bd. 1 **VI**. Verlag von Fischer G. , 1904. [1](#)
- [Abramowitz, Stegun] Abramowitz, M. und Stegun, I. A. (1972). Handbook of mathematical functions. Dover Publications, Inc., New York. [38](#), [40](#), [43](#)
- [Bronstein] Bronstein, I. N. und Semendjajew, K. A. (1987). Taschenbuch der Mathematik. Verlag Harri Deutsch. 23'te Auflage 1987, Thun und Frankfurt(Main). [43](#)
- [Busch 1927] Busch, H. (1927). Über die Wirkungsweise der Konzentrierungsspule bei der Braunschen Röhre. Arch. Elektrotech. **18**, 583. [1](#), [14](#)
- [Dallmann, Elster] Dallmann, H. und Elster K. H. (1983). Einführung in die höhere Mathematik. Bd. 3, Vieweg Verlag, 1983, 110–117. [31](#), [38](#)
- [de Broglie 1927] de Broglie, L. (1927). Untersuchungen zur Quantentheorie. Annales de Physique **3**, 10. Übersetzt von Becker, W. (1927), Akademische Verlagsgesellschaft Leipzig 1927. [14](#), [16](#)
- [Degenhardt 1992] Degenhardt, R. (1992). Korrektur von Aberrationen in der Teilchenoptik mit Hilfe von Symmetrien. Dissertation, Inst. für Angewandte Physik, TU Darmstadt **D 17**. [4](#), [8](#), [34](#), [79](#)
- [Deuffhard 1982] Deuffhard, P. und Bauer, H. J. (1982). A Note on Romberg Quadrature. Univ. Heidelberg, Sfb 123, Tech. Rep. 169. [80](#)
- [Deuffhard 1984] Deuffhard, P. , Fiedler, B. und Kunkel, P. (1984). Efficient Numerical Pathfollowing Beyond Critical Points. Univ. Heidelberg, Sfb 123, Tech. Rep. 278. [77](#)
- [Deuffhard 1993] Deuffhard, P. und Hohmann, A. (1993). Numerische Mathematik I. de Gruyter Verlag, 2'te Auflage 1993, Kap. 3.1, Kap. 3.3 und Kap. 4.4. [76](#), [77](#)
- [Dymnikov 1965a] Dymnikov, A. D. , Fishkova, T. Ya. , Yavor, S. Ya. (1965). Effect of geometrical parameters on optical characteristics of a system of four quadrupole lenses similar to an axisymmetric lens. Soviet Physics–Technical Physics **10**, 340. [56](#)

- [Dymnikov 1965b] Dymnikov, A. D. , Fishkova, T. Ya. , Yavor, S. Ya. (1965). Using a rectangular model to obtain analytical expressions for spherical aberration of electromagnetic quadrupole lenses. *Phys. Letters* **15**, 132. [80](#)
- [Gerheim 1993] Gerheim, V. (1993). Berechnung eines variablen Projektivsystems für ein energiefilterndes Transmissions–Elektronenmikroskop. Diplomarbeit, Inst. für Angewandte Physik, TU Darmstadt, unveröffentlicht. [91](#)
- [Glaser] Glaser, W. (1952). Grundlagen der Elektronenoptik. Springer Verlag, 1'te Auflage 1952. [19](#), [33](#)
- [Goldstein] Goldstein, H. (1989). Klassische Mechanik. Aula Verlag, 10'te überarbeitete Auflage 1989, 340–348. [17](#)
- [Großmann] Großmann, S. (1988). Mathematischer Einführungskurs für die Physik. Teubner, 5'te durchges. und erw. Auflage 1988, 259 ff. [41](#)
- [Gubbens 1998] Gubbens, A. J. , Brink, H. , A. , Kundmann, M. , K. , Friedmann, S. L. , Krivanek, O. L. (1998). A Post–Column Imaging Energy Filter with a 2048^2 –Pixel Slow–Scan CCD Camera. *Micron* **29**, No. 1, 81. [8](#)
- [Haider 1982] Haider, M. , Bernhardt, W. und Rose, H. (1982). Design and test of an electric and magnetic dodecapole lens. *Optik* **63**, 9. [44](#), [45](#), [46](#)
- [Hawkes 1966] Hawkes, P. W. (1966). Quadrupole Optics, in Höhler, G. (1966), Springer Tracts in Modern Physics, Ergebnisse der exakten Naturwissenschaften **42**. Springer Verlag, 1966. [80](#)
- [Hofer 1990] Hofer, F. (1990). Elektronenenergieverlustspektroskopie – eine neue mikroanalytische Methode in der Elektronenmikroskopie. Österreichische Chemie'sche Zeitschrift **91**, 76. [4](#), [6](#), [8](#)
- [Hoffstätter 1991] Hoffstätter, G. H. (1991). Geometrische Elektronenoptik angewandt auf ein durch Hexapole korrigiertes Mikroskop mit sub Å Auflösung. Diplomarbeit, Inst. für Angewandte Physik, TU Darmstadt, unveröffentlicht. [31](#), [33](#)
- [Jackson] Jackson, J. D. (1982). Klassische Elektrodynamik. de Gruyter Verlag, 2'te verbesserte Auflage 1982, 122–130. [35](#)
- [Kahl 1999] Kahl, F. (1999). Design eines Monochromators für Elektronenquellen. Dissertation, Inst. für Angewandte Physik, TU Darmstadt **D 17**. [2](#)
- [Kawakatsu 1968] Kawakatsu, H. , Vosburgh, G. , Siegel, B. M. (1968). Electron–Optical Properties of a Quadrupole Quadruplet Projector Lens. *Journal of Applied Physics* **39**, 245. [56](#)
- [Krivanek 1995] Krivanek, O. L. , Friedmann, S. L. , Gubbens, A. J. , Kraus, B. (1995). An imaging filter for biological applications. *Ultramicroscopy* **59**, 267. [12](#), [52](#), [53](#), [79](#)

- [Lanio 1986] Lanio, S. (1986). High-Resolution imaging magnetic energy filters with simple structure. *Optik* **73**, 99. [2](#), [4](#)
- [Lenz 1950] Lenz, F. (1950). Annäherung von rotationssymmetrischen Potentialfeldern mit zylindrischen Äquipotentialflächen durch eine analytische Funktion. *Annalen der Physik* **8**, 124. [86](#), [111](#)
- [LEO] LEO Elektronenmikroskopie GmbH, Oberkochen. Persönliche Mitteilung. [12](#), [83](#), [103](#)
- [Marx 1997] Marx, G. K. L. , Gerheim, V. , Schönhense, G. (1997). Multipole WIEN-filter for a high-resolution X-PEEM. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*. **84**, 251. [115](#)
- [Plies, Rose 1971] Plies, E. und Rose, H. (1971). Über die axialen Bildfehler magnetischer Ablensysteme mit krummer Achse. *Optik* **34**, 171. [14](#)
- [Plies, Typke 1978] Plies, E. und Typke, D. (1978). Dreidimensional abbildende Elektronenmikroskope, II. Theorie elektronenoptischer Systeme mit gekrümmter Achse. *Z. Naturforschung* **33a**, 1361. [20](#), [22](#), [23](#), [26](#)
- [Preikszas 1995] Preikszas, D. (1995). Korrektur des Farb- und Öffnungsfehlers eines Niederspannungs-Elektronenmikroskops mit Hilfe eines Elektronenspiegels. Dissertation, Inst. für Angewandte Physik, TU Darmstadt. [37](#)
- [Rheinboldt 1983] Rheinboldt, W. und Burkhardt, J. (1983). Algorithm 596, A Program for a Locally Parameterized Continuation Process. *ACM Transactions on Mathematical Software*, Volume **9**, Number 2, 236. [77](#)
- [Riecke 1982] Riecke, W. D. (1982). Practical Lens Design, in Hawkes, P. W. (1982), *Magnetic Electron Lenses*. Springer Verlag, 1982, 163. [11](#), [73](#)
- [Rose 1966/1967] Rose, H. (1966/1967). Allgemeine Abbildungseigenschaften unrunder Elektronenlinsen mit gerader Achse. *Optik* **24**, 36. [19](#), [26](#)
- [Rose 1970] Rose, H. (1970). Berechnung eines elektronenoptischen Apochromaten. *Optik* **31**, 144. [60](#), [79](#)
- [Rose 1971] Rose, H. (1971). Elektronenoptische Aplanate. *Optik* **34**, 285. [12](#), [64](#)
- [Rose 1987a] Rose, H. (1987). The retarding Wien filter as a high-performance imaging filter. *Optik* **77**, 26. [3](#), [8](#), [24](#), [44](#), [45](#), [105](#), [106](#), [109](#), [113](#)
- [Rose 1987b] Rose, H. (1987). Hamiltonian Magnetic Optics. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* **A258**, 374. [17](#), [18](#), [20](#), [29](#), [30](#), [33](#)
- [Rose 1990a] Rose, H. (1990). Outline of a spherically corrected semiaplanatic medium-voltage transmission electron microscope. *Optik* **85**, 19. [1](#), [2](#)

- [Rose 1990b] Rose, H. (1990). Inhomogeneous Wien filter as a corrector compensating for the chromatic and spherical aberration of low-voltage electron microscopes. *Optik* **84**, 91. [105](#), [108](#), [110](#), [115](#)
- [Rose 1994a] Rose, H. (1994). Correction of aberrations, a promising means for improving the spatial and energy resolution of energy-filtering electron microscopes. *Ultramicroscopy* **56**, 11. [1](#)
- [Rose 1994b] Rose, H. (1994). Teilchenoptik. Scriptum an der TU Darmstadt, unveröffentlicht. [26](#), [28](#), [50](#), [57](#)
- [Rose 1995] Rose, H. (1995). Nichtlineare Teilchenoptik. Scriptum an der TU Darmstadt, unveröffentlicht. [8](#), [12](#), [53](#), [82](#)
- [Rose 1999] Rose, H. (1999). Prospects for realising a sub-Å sub-eV resolution EFTEM. *Ultramicroscopy* **78**, 13. [2](#), [12](#), [52](#), [53](#), [68](#), [74](#), [81](#)
- [Rose, Petri 1971] Rose, H. und Petri, U. (1971). Zur systematischen Berechnung elektronenoptischer Bildfehler. *Optik* **33**, 151. [25](#)
- [Rose, Plies 1974] Rose, H. und Plies, E. (1974). Entwurf eines fehlerarmen magnetischen Energie-Analysators. *Optik* **40**, 336. [2](#), [4](#)
- [Sakurai] Sakurai, J. J. (1994). Modern quantum mechanics. Addison-Wesley, Revised Edition 1994, 101–109. [17](#), [18](#)
- [Scherzer 1936a] Scherzer, O. (1936). Berechnung der Bildfehler dritter Ordnung nach der Bahnmethode, in Busch, H. und Brüche, E. (1936), Beiträge zur Elektronenoptik. Barth, Leipzig 1936, 33. [26](#), [32](#)
- [Scherzer 1936b] Scherzer, O. (1936). Über einige Fehler von Elektronenlinsen. *Zeitschrift für Physik* **101**, 593. [1](#)
- [Spellucci 1988] Törnig, W. und Spellucci, P. (1988). Numerische Mathematik für Ingenieure und Physiker, Numerische Methoden der Algebra, Band 1. Springer Verlag, 2'te Auflage 1988. [73](#), [76](#)
- [Spellucci 1990] Törnig, W. und Spellucci, P. (1990). Numerische Mathematik für Ingenieure und Physiker, Numerische Methoden der Analysis, Band 2. Springer Verlag, 2'te Auflage 1990. [80](#), [85](#), [111](#)
- [Tsuno 1993] Tsuno, K. (1993). Electron optical analysis of a retarding Wien filter for electron spectroscopic imaging. *Rev. Sci. Instrum.* **64**, 659. [105](#)
- [Uhlemann 1994] Uhlemann, S. (1994). The MANDOLINE filter – a new high-performance imaging filter for sub-eV EFTEM. *Optik* **96**, 163. [2](#), [4](#), [12](#), [34](#), [37](#), [103](#), [113](#), [117](#)

- [Uhlemann 1995] Uhlemann, S. (1995). Aufbau und Leistungsgrenzen korrigierter analytischer Transmissions-Elektronenmikroskope. Dissertation, Inst. für Angewandte Physik, TU Darmstadt **D 17**. [12](#), [22](#), [24](#), [26](#), [31](#)
- [Uhlemann 1996] Uhlemann, S. und Rose, H. (1996). Acceptance of imaging energy filters. *Ultramicroscopy* **63**, 161. [53](#), [79](#), [81](#)
- [Wien 1898] Wien, W. (1898). Untersuchungen über die electrische Entladung in verdünnten Gasen. *Annalen der Physik* **65**, 440. [105](#)

Abbildungsverzeichnis

2.1	Eine schematische Darstellung für eine Abbildung des Objektes in einem EFTEM.	5
2.2	Eine schematische Darstellung für eine Abbildung des Energieverlustspektrums in einem EFTEM.	7
2.3	Eine schematische Darstellung der Bahnen und Austrittsebenen hinter dem Filter.	9
2.4	Eine schematische Darstellung für eine stigmatische Abbildung mit Quadrupolen.	13
3.1	Der kanonische Impuls \mathbf{p} steht senkrecht auf den Flächen konstanter Phase $S(\mathbf{r}) - Et$	17
3.2	Die Konstruktion der bildseitigen Kardinalpunkte.	28
3.3	Die angenommene Polschuhgeometrie eines Multipols in der xy und der ρz Ebene.	36
3.4	Die angenommene Randbedingung für das Potential eines Multipolelements.	37
3.5	Integrationswege in der komplexen k -Ebene für die verschiedenen Fallunterscheidungen der Werte von z	39
3.6	Die angenommene spezifische Ringladungsdichte.	42
3.7	Die SCOFF-Näherung, schraffierte Flächen sind gleich groß.	47
4.1	Der Lösungsraum eines abbildenden Sextupletts.	61
4.2	Die Fundamentalbahnen eines abbildenden Sextupletts	61
4.3	Die Brechkraft des ersten Quadrupoles eines abbildenden Sextupletts im Parameterraum.	62
4.4	Der Lösungsraum eines Sextupletts für die Vergrößerung $V = -10$	62
4.5	Die Fundamentalbahnen eines abbildenden Sextupletts mit 10-facher Vergrößerung	63

4.6	Der Lösungsraum eines Sextupletts für die Vergrößerung $V = -100$	63
4.7	Eine Skizze zur Funktionsweise des Tripletts.	66
4.8	Eine Skizze zur Funktionsweise des zweiten Tripletts mit anamorphotischer Abbildung.	67
4.9	Die Vergrößerung der Bitriplett-Anordnung in Abhängigkeit des Parameter- raumes.	72
4.10	Die Fundamentalbahnen eines abbildenden Bitripletts.	72
4.11	Geometrisch anschauliche Darstellung der Bestimmung der Lösungskurve der Bitriplett-Anordnung.	73
4.12	Die Fundamentalbahnen in der Näherung dünner Quadrupole für die Ab- bildung des Energieverlustspektrums mit einem Energieverlustfenster von 500 eV.	78
4.13	Die Fundamentalbahnen in SCOFF-Näherung für eine stigmatische Abbil- dung mit Vergrößerung $V = 120$	88
4.14	Die Fundamentalbahnen mit Berücksichtigung ausgedehnter Randfelder für eine stigmatische Abbildung mit Vergrößerung $V = 120$	88
4.15	Die Fehlerkoeffizienten der Verzeichnung in Abhängigkeit der Vergrößerung für die elementspezifische Abbildung bei hoher Vergrößerung.	89
4.16	Die Verzeichnung in der xy -Filmebene.	89
4.17	Die Ampèrewindungen der Quadrupole in Abhängigkeit der Vergrößerung für die elementspezifische Abbildung bei hoher Vergrößerung.	90
4.18	Das quadratisch gemittelte Fehlerscheibchen in Abhängigkeit der Vergröße- rung für die elementspezifische Abbildung bei hoher Vergrößerung.	90
4.19	Der größte auftretende Fehlerkoeffizient in Abhängigkeit der Vergrößerung für die elementspezifische Abbildung bei hoher Vergrößerung.	92
4.20	Der Index des größten auftretenden Fehlerkoeffizienten in Abhängigkeit der Vergrößerung für die elementspezifische Abbildung bei hoher Vergrößerung.	92
4.21	Die Ampèrewindungen der Quadrupole in Abhängigkeit der Vergrößerung für die elementspezifische Abbildung bei niedriger Vergrößerung.	94
4.22	Die Fundamentalbahnen in SCOFF-Näherung für eine stigmatische Abbil- dung mit Vergrößerung $V = 60$	95
4.23	Die Fundamentalbahnen mit Berücksichtigung ausgedehnter Randfelder für eine stigmatische Abbildung mit Vergrößerung $V = 60$	95

4.24	Die Fehlerkoeffizienten der Verzeichnung in Abhängigkeit der Vergrößerung für die elementspezifische Abbildung bei niedriger Vergrößerung.	96
4.25	Das quadratisch gemittelte Fehlerscheibchen in Abhängigkeit der Vergrößerung für die elementspezifische Abbildung bei niedriger Vergrößerung. . . .	96
4.26	Die Fundamentalbahnen in SCOFF-Näherung für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 60$ eV.	99
4.27	Die Fundamentalbahnen mit Berücksichtigung ausgedehnter Randfelder für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 60$ eV.	99
4.28	Die Fundamentalbahnen in SCOFF-Näherung für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 200$ eV.	100
4.29	Die Fundamentalbahnen mit Berücksichtigung ausgedehnter Randfelder für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 200$ eV.	100
4.30	Die Fundamentalbahnen in SCOFF-Näherung für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 300$ eV.	101
4.31	Die Fundamentalbahnen mit Berücksichtigung ausgedehnter Randfelder für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 300$ eV.	101
4.32	Die Fundamentalbahnen in SCOFF-Näherung für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 500$ eV.	102
4.33	Die Fundamentalbahnen mit Berücksichtigung ausgedehnter Randfelder für eine astigmatische Abbildung mit Energiefenster $\Delta E = 500$ eV.	102
5.1	Eine Skizze der Fundamentalbahnen des einfachsymmetrischen Wienfilters.	108
5.2	Die Fundamentalbahnen des Wienfilters mit Randfeld.	112
5.3	Die Multipolkoeffizienten des Wienfilters mit Randfeld.	112
5.4	Die Bahnen der geometrischen Bildfehlerkoeffizienten des Wienfilters mit Randfeld.	114
5.5	Die Bahnen der chromatischen Bildfehlerkoeffizienten des Wienfilters und der Anpassungsoptik mit Randfeld.	114

Tabellenverzeichnis

4.1	Die Geometrieparameter für ein ausgewähltes Projektivsystem.	86
4.2	Vergleich der Ampèrewindungen für verschiedene Felder (ESI).	87
4.3	Die Fehlerkoeffizienten für eine Vergrößerung von $V = 120$ (ESI).	93
4.4	Vergleich der Ampèrewindungen für verschiedene Felder (EELS).	98
4.5	Die Bildfehler bei der Abbildung des Energiespektrums.	103
4.6	Die Energieauflösung bei der Abbildung des Energiespektrums.	104
5.1	Die Bedingungen an die Multipolfelder für ein in zweiter Ordnung korrigiertes Wien-Filter.	110

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. H. Rose für die Vergabe dieser Arbeit. Seine hilfreichen Diskussionen und Anregungen und seine stets vorhandene Gesprächsbereitschaft haben mir bei der Erstellung dieser Arbeit geholfen.

Herrn Dr. D. Krahel möchte ich für seine Ratschläge hinsichtlich einer experimentellen Realisierbarkeit und seiner Diskussionsbereitschaft danken.

Herrn Dr. Peter Schmid sei für viele hilfreiche Diskussionen und seine Unterstützung gedankt.

Bei den Herren Dipl. Phys. Peter Hartel, Dr. Frank Kahl, Dr. Heiko Müller, Dr. Dirk Preiksas, Dr. Rainer Spehr, Dr. Stephan Uhlemann und Dipl. Phys. Christoph Weißbäcker möchte ich mich für viele Gespräche und Hilfe bedanken.

Allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. H. Rose sei an dieser Stelle für das angenehme Arbeitsklima gedankt.

Der deutschen Forschungsgemeinschaft gilt mein Dank für die Finanzierung dieser Arbeit.

Lebenslauf

Name	Volker Gerheim
geboren	10. Juni 1968
Geburtsort	Limburg
Staatsangehörigkeit	deutsch

Bildungsweg

1974 – 1978	Grundschule Karl von Ibell Schule Diez
1978 – 1980	Orientierungsstufe Staatliches Gymnasium Diez
1980 – 1987	Staatliches Gymnasium Diez
Juni 1987	Reifeprüfung
1988 – 1993	Studium der Physik an der TH Darmstadt
Dezember 1990	Vordiplomprüfung in Physik
November 1993	Diplomprüfung in Physik
1995 – 1999	Studium der Physik und Mathematik für das Lehramt an Gymnasien
Dezember 1999	erstes Staatsexamen für das Lehramt an Gymnasien

Beruflicher Werdegang

1994 – 1995	Stipendium an der Johannes Gutenberg Universität Mainz
1996 – 2000	Wissenschaftlicher Mitarbeiter im Institut für Angewandte Physik an der TU Darmstadt